

TREBALL FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

**MATRIUS DE MICROFIBRES PREPARADES DE MESCLES DE
POLÍMERS BIODEGRADABLES AMB ENZIMS PER ACCELERAR
LA SEVA DEGRADACIÓ**



Memòria i Annexos

Autor: Joan Cirer Pallarès
Director: Aureli Calvet Tarragona
Convocatòria: Octubre 2017

Resum

L'estudi d'aquest projecte s'ha centrat en la producció de matrius de microfibres de dos biopolímers concrets (PLA i PBT) per tal d'estudiar la seva degradació durant un temps determinat en diversos casos amb diferents condicions de medi mesurant el grau d'aquesta degradació a partir de diferencials de pes abans i després del temps d'exposició a un enzim.

Per tal d'aconseguir aquestes matrius, s'ha portat a terme un estudi sobre les propietats d'aquests materials i el seu comportament al ser tractats mitjançant un procés d'electrofilat amb l'objectiu d'establir les condicions ideals per a realitzar l'experiment.

El medi de degradació al qual s'han sotmès les mostres es tracta d'una solució PBS, preparada amb una composició per tal de simular les condicions del cos humà.

La novetat que incorpora aquest estudi és l'addició de l'enzim lipasa per tal d'observar quin efecte pot tenir aquest sobre la degradació i en quin grau l'accentua. L'addició esmentada d'aquest enzim s'ha portat a terme de dues maneres: dissolta al medi constituït per la solució i, per altra banda, incorporada directament a les fibres de les matrius fabricades, per tal de veure en quin cas actua millor.

Resumen

El objetivo de este proyecto se centra en la producción de matrices de microfibras de dos biopolímeros concretos (PLA i PBT) con tal de estudiar su degradación durante un tiempo determinado en diferentes casos con diversas condiciones de medio midiendo el grado de esta degradación a partir de los diferenciales de peso que se dan en las muestras entre antes y después del tiempo de exposición a un enzima.

Con tal de conseguir estas matrices, se ha realizado un estudio sobre las propiedades de estos materiales i su comportamiento al ser tratados mediante un proceso de electrohilado con el objetivo de establecer las condiciones ideales para realizar el experimento.

El medio de degradación al cual se han sometido las muestras se trata de una solución PBS, preparada con una composición concreta que pretende simular las condiciones del cuerpo humano.

La novedad que presenta este estudio es la adición del enzima lipasa con tal de observar el efecto que este pueda tener sobre la degradación i hasta que punta la acentúa. La adición de este enzima se ha llevado a cabo de dos maneras distintas: disuelta en el medio constituido por la solución y, por otro lado, incorporada directamente en las fibras de las matrices fabricadas, para observar en que caso actúa mejor.

Abstract

The main purpose of this study has been the production of some matrix of microfibers from 2 specific biopolymers (PLA and PBT) to study the degradation experienced during a certain time in diverse conditions to establish the grade of this degradation. This was done calculating weight differentials between before and after the exposition time to the enzyme.

To obtain the necessary matrix, a study has been conducted about the properties of these materials and their performance when being treated in a process of electrospinning to determine the optimal conditions to proceed with the experiment.

The medium in which the degradation has taken place is a PBS solution, prepared with a composition trying to emulate the human body conditions.

The novelty included in this project is the addition of the lipase enzyme with the objective of being able to determine the effect the presence of it on the degradation and to which point it's able to boost it. The addition of this enzyme has been done in 2 different ways: dissolved in the PBS solution and added directly in the matrix microfibers. The point is to observe in which case it acts better.

Glossari

En aquest apartat es pretén fer una descripció breu i concisa de conceptes clau que apareixen en aquest projecte per tal d'ajudar a la comprensió ràpida de la lectura.

Polímer: Molècula llarga formada per petites unitats repetides de manera successiva anomenades monòmers. Presenten una variabilitat de propietats molt gran i juguen un paper fonamental en el món industrial. Es divideixen en polímers sintètics i biopolímers.

Biopolímer: Els biopolímers són polímers produïts per els éssers vius. Al ser polímers, estan formats per unitats monomèriques unides per enllaços covalents, i la diferència principal que presenten respecte els polímers sintètics és la seva biodegradabilitat.

Enzim: Els enzims són biocatalitzadors macromoleculars presents en els éssers vius. La seva funció consisteix en l'acceleració de reaccions químiques necessàries per a funcions tant bàsiques com l'obtenció d'energia a partir de la ruptura d'enllaços.

Electrofilat: Procediment a partir del qual s'aconsegueix convertir una solució de polímer dissolt en una xarxa de microfibrilles mitjançant l'aplicació d'un camp elèctric. Les fibres obtingudes poden tenir un gruix de l'ordre d'uns cents nanòmetres.

Solució PBS: Sigles de Phosphate-Buffered Saline, es tracta d'una solució aquosa amb una composició que imita les condicions que es donarien en les matrius cel·lulars del cos humà, mantenint un pH constant.

Liofilització: Procés d'assecat mitjançant el qual s'aconsegueix extreure quasi la totalitat de l'aigua present en un material. Es utilitza principalment en la indústria alimentària, per tal de millorar les condicions de conservació dels aliments.

Índex de figures

<i>Figura 1. Diferents vies d'obtenció i estructura del PLA</i>	<i>12</i>
<i>Figura 2. Estructura del PBT</i>	<i>14</i>
<i>Figura 3. Esquema del procés d'electrospinning</i>	<i>15</i>
<i>Figura 4. Distribució de càrregues a través del flux</i>	<i>16</i>
<i>Figura 5. Exemple de fibres obtingudes a través d'electrospinning</i>	<i>17</i>
<i>Figura 6. Esquema de ruptura de l'enllaç èster</i>	<i>18</i>
<i>Figura 7. Ruptura d'enllaç èster en presència de lipasa</i>	<i>18</i>
<i>Figura 8. Relació entre la temperatura d'evaporació de l'aigua i la pressió</i>	<i>21</i>
<i>Figura 9. Diagrama de flux</i>	<i>23</i>
<i>Figura 10. Estufa usada en primera instància per a l'asseccament</i>	<i>27</i>
<i>Figura 11. Màquina de buit usada per l'asseccament</i>	<i>28</i>
<i>Figura 12. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA a 300 augments</i>	<i>29</i>
<i>Figura 13. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA a 1000 augments</i>	<i>30</i>
<i>Figura 14. Representació de la degradació obtinguda (PLA)</i>	<i>32</i>
<i>Figura 15. Representació de la degradació obtinguda (PLA en PBS amb enzim)</i>	<i>34</i>
<i>Figura 16. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA amb enzim a 300 augments</i>	<i>35</i>
<i>Figura 17. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA amb enzim a 1000 augments</i>	<i>36</i>
<i>Figura 18. Representació de la degradació obtinguda (PLA amb enzim)</i>	<i>38</i>
<i>Figura 19. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT a 300 augments</i>	<i>39</i>
<i>Figura 20. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT a 1000 augments</i>	<i>40</i>
<i>Figura 21. Representació de la degradació obtinguda (PBT)</i>	<i>42</i>
<i>Figura 22. Representació de la degradació obtinguda (PBT en PBS amb enzim)</i>	<i>44</i>
<i>Figura 23. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT amb enzim a 300 augments</i>	<i>45</i>
<i>Figura 24. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT amb enzim a 1000 augments</i>	<i>46</i>

Figura 25. Representació de la degradació obtinguda (PBT amb enzim)48

Índex de taules

<i>Taula 1. Condicions aplicades en electrospinning per al recolliment de les matrius</i>	<i>24</i>
<i>Taula 2. Composició de la solució PBS</i>	<i>25</i>
<i>Taula 3. Degradació corresponent al PLA</i>	<i>31</i>
<i>Taula 4. Degradació corresponent al PLA en PBS amb enzim</i>	<i>33</i>
<i>Taula 5. Degradació corresponent al PLA amb enzim</i>	<i>37</i>
<i>Taula 6. Degradació corresponent al PBT</i>	<i>41</i>
<i>Taula 7. Degradació corresponent al PBT en PBS amb enzim</i>	<i>43</i>
<i>Taula 8. Degradació corresponent al PBT amb enzim</i>	<i>47</i>
<i>Taula 9. Costos corresponents a les despeses materials</i>	<i>51</i>
<i>Taula 10. Costos corresponents a les despeses personals</i>	<i>51</i>
<i>Taula 11. Costos corresponents a les despeses d'amortització</i>	<i>51</i>
<i>Taula 12. Despeses totals del projecte</i>	<i>52</i>

Índex

RESUM	I
RESUMEN	II
ABSTRACT	III
GLOSSARI	IV
ÍNDEX DE FIGURES	V
ÍNDEX DE TAULES	VII
1. INTRODUCCIÓ	11
1.1. Objectius	12
1.2. Biopolímers d'interès.....	12
1.3. Conceptes teòrics aplicats	15
2. METODOLOGIA	22
2.1. Explicació procedimental.....	22
2.2. Diagrama de flux.....	23
3. ESTUDI PREVI	24
3.1. Determinació de condicions òptimes.....	24
3.2. Preparació de la solució PBS.....	25
3.3. Preparació mostres i disseny de l'estudi	26
3.4. Procés d'assecat.....	27
4. RESULTATS	29
4.1. PLA en PBS (sense enzim)	29
4.2. PLA en PBS amb enzim en dissolució	33
4.3. PLA amb enzim incorporat a les fibres en PBS.....	35
4.4. PBT en PBS (sense enzim).....	39
4.5. PBT en PBS amb enzim en dissolució	43
4.6. PBT amb enzim incorporat a les fibres en PBS.....	45
CONCLUSIONS	49
AVALUACIÓ ECONÒMICA	51
BIBLIOGRAFIA	53

VIST I PLAU D'AUTORIZACIÓ DE DEFENSA DE TREBALL FI DE GRAU _____ ¡ERROR!
MARCADOR NO DEFINIDO.

ANNEX A: TAULES DE MOSTRES PRÈVIES _____ 55

ANNEX B: IMATGES COMPLEMENTÀRIES _____ 59

ANNEX C: FULLS DE SEURETAT _____ 82



1. Introducció

El terme biopolímer va ser usat per primera vegada l'any 1957, i és usat per a referir-se als polímers que son produïts per éssers vius. Al tractar-se d'un tipus de polímers, la seva estructura està formada per unitats monomèriques unides entre elles a través d'enllaços covalents per formar altres estructures més grans i de superior complexitat.

Principalment, el que diferencia els biopolímers dels polímers sintètics és la seva estructura. En el cas dels biopolímers, en la gran majoria dels casos els monòmers que formen la seva estructura primària es troben en una distribució uniforme ben definida, mentre que en el cas dels polímers sintètics es troba una disposició molt més dispersa i aleatòria dels seus monòmers, cosa que impedeix el plegament de l'estructura primària.

Per tant, la pregunta és: quins avantatges i desavantatges presenten els biopolímers respecte els polímers sintètics? És difícil poder debatre aquesta pregunta sense posar exemples específics d'ús, però l'avantatge principal que presenten els biopolímers és que son biodegradables i, per tant, no produeixen residus que puguin afectar negativament al medi ambient, a més de poder ser produïts a partir de fonts renovables. Per altra banda, el desavantatge principal que presenten el trobem en la viabilitat de la producció; a la llarga, seria molt interessant poder substituir polímers sintètics vistos com a nocius (com les bosses de plàstic d'ús immensament estès en la societat actual), però els mètodes actuals de producció de biopolímers son poc eficients i incapaços d'adaptar-se (com a mínim de moment) per a una producció industrial competitiva.

Tot i això, ja existeixen alguns camps on l'ús dels biopolímers cada vegada és més extens, com per exemple en l'àmbit de la medicina. La no toxicitat d'alguns d'aquests components (com els polilàctics) permet el seu ús en implants que no requereixen de cirurgia d'extracció. Aquesta és una de les vies on més avança la investigació en els darrers anys, ja que els beneficis potencials son enormes de cara a la possibilitat de salvar vides.

L'objecte d'aquest estudi se centrarà específicament en la degradació d'aquests biopolímers, amb una sèrie d'experiments dissenyats amb aquest objectiu. La mesura d'aquesta degradació es mesurarà a través de diferencials de pes i, la novetat que es presenta en aquest estudi és l'addició d'enzims per provar d'incrementar aquest efecte de degradació.

1.1. Objectius

Els objectius principals de l'estudi son els següents:

- Establir les condicions òptimes per a la formació de les microfibras necessàries en cada cas per a l'estudi.
- Estudiar i quantificar la degradació produïda en cadascun dels casos plantejats sobre els biopolímers designats (PLA i PBT).
- Observar quin efecte produeix sobre aquesta degradació l'addició d'enzims.

1.2. Biopolímers d'interès

Aquest projecte s'ha centrat en l'estudi de dos polímers concrets i les seves propietats: PLA i PBT.

• PLA

L'àcid polilàctic (PLA) és un biopolímer obtingut principalment de la derivació del midó de blat de moro o canya de sucre. Es tracta d'un polièster alifàtic i termoplàstic i és un dels bioplàstics d'ús més popularitzat en l'actualitat. El procediment principal mitjançant el qual s'obté aquest component és a través de la ruptura d'anell del lactat, generalment en presència de catalitzadors metàl·lics. Una altra manera d'obtenir PLA és a través de la condensació directa de monòmers d'àcid làctic a temperatures no superiors a 200°C.

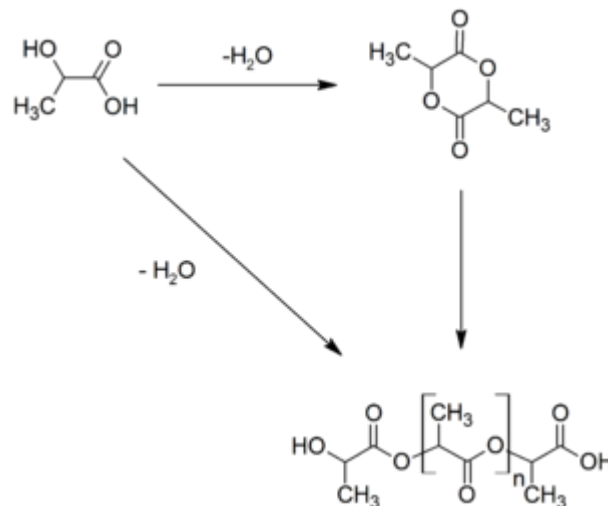


Figura 1. Diferents vies d'obtenció i estructura del PLA (Font: <https://tinyurl.com/ovgropb>)

Es poden trobar diferents formes estructurals de PLA degut a la seva quiralitat, per exemple, el PLLA (o poli-L-làctic) es pot obtenir a partir de la polimerització del L-lactat. Aquest PLLA té una temperatura de transició cristal·lina al voltant dels 60°C, una cristal·linitat del 37% i una

temperatura de fusió de 175°C. En quant a la solubilitat, trobem que el PLA pot ser soluble en benzé escalfat, THF, dioxà i solvents clorats.

Dins les aplicacions específiques del PLA cal destacar-ne les següents: en primer lloc, el PLA pot ser processat per extrusió en màquines com impressores 3D. També pot ser utilitzat com a material d'empaquetament degradable, com gots o bosses. Per altra banda, i potser el seu ús més interessant actualment, és que aquest PLA pot ser usat com a implant mèdic en una varietat de formes considerable, amb gran quantitat d'aplicacions dins el cos. Segons el tipus d'implant usat, aquest un cop introduït al cos pot tardar entre 6 mesos i 2 anys a degradar-se, cosa que li dona molt valor com a estructura de suport temporal, transferint de manera progressiva el pes a l'ós de nou permetent al cos adaptar-se poc a poc a la normalitat. A més a més, a través d'un procés de despolimerització tèrmica aquest PLA pot ser reciclat i reutilitzat sense pèrdua de les seves propietats originals, tot i que el procediment encara és relativament car.

En resum, el gran avantatge que presenta l'ús d'aquest biopolímer és la seva versatilitat i el fet de que la seva degradació no produeix components tòxics per al medi ambient. Per exemple, una ampolla d'aigua de plàstic abocada a l'oceà trigaria entre 6 i 24 mesos a degradar-se completament i no deixar rastre, en contraposició als plàstics actuals que poden trigar dins el rang dels cents inclús milers d'anys. Regularitzar l'ús del PLA suposaria aconseguir un sistema de producció de plàstics sense la necessitat de petroli, cosa que contribuiria de manera molt notable a solucionar els problemes de contaminació i escalfament global que son presents al món actual.

Per altra banda, el desavantatge principal que presenta l'ús del PLA en alguns casos és la seva relativament baixa temperatura de transició cristal·lina (com s'ha esmentat abans, al voltant dels 60°C). Aquesta propietat fa que el PLA no sigui adequat per a aplicacions on sigui necessari resistir temperatures elevades. Inclús un automòbil exposat al sol un dia calorós assoliria temperatures suficientment elevades com per provocar degradació o estovar parts del material.

Referent a la degradació del PLA, al tractar-se d'un polièster tenim que aquests normalment son degradats per hidròlisi atacant l'enllaç èster, alliberant una molècula d'alcohol i àcid. Però en el cas concret del PLA, el monòmer d'àcid làctic conté els dos grups funcionals implicats, per tant, primerament el PLA es degrada en oligòmers i posteriorment arriba la degradació en monòmers. Queda clar doncs, que si no hi ha contacta amb aigua no es produirà cap tipus de degradació. Així doncs, s'espera obtenir una degradació considerable del PLA en aquest experiment. Segons altres estudis, és possible arribar a aconseguir una pèrdua de massa al voltant del 20%.

- **PBT**

El polibutilén tereftalat (o PBT) és un biopolímer obtingut principalment a partir de la polimerització del butandiol i l'àcid tereftàlic. Es tracta d'un material termoplàstic semi cristal·lí amb propietats aïllants, mecànicament resistent, i resistent a l'acció de dissolvents. També és termo-resistent fins al voltant dels 150 °C, i el seu punt de fusió és de 223 °C.

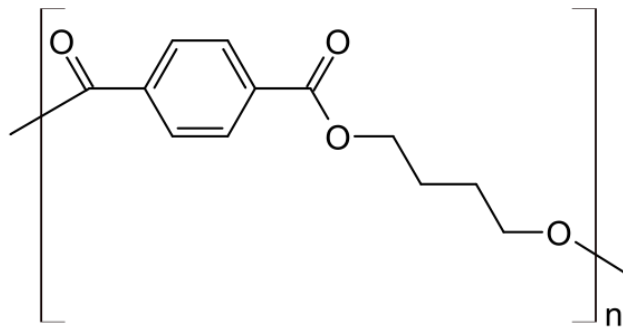


Figura 2. Estructura del PBT (Font: <https://tinyurl.com/nc67opt>)

La resistència mecànica que presenta aquesta material, el fet de tenir un punt de fusió més baix que el PET (223 contra 250) i la seva ràpida cristal·lització al refredar-se fa del PBT un material ideal per a la modelització de peces a través de procediments d'injecció. Degut a aquestes propietats, és usat en multitud d'aplicacions, especialment elèctriques i parts petites de màquina, gràcies a la seva elevada resistència elèctrica i mecànica. Fins fa uns anys també s'usava per a la producció de canonades d'ús residencial degut al baix cost de producció, però es va descobrir que aquestes presentaven degradació després de llargs períodes de temps exposades a químics oxidants, així que ja no s'usa per aquest propòsit avui en dia. Alguns dels altres usos variats que es dona al PBT són, per exemple, la implementació com a fibra en raspalls de dents cel·les falses. Queda clar doncs que aquest material presenta una resistència a la degradació considerable tot i ser exposat a una gran varietat de condicions molt diferents.

Altres experiments estudien la termo-degradació d'aquest material, però en condicions molt més complexes que en aquest projecte i, a priori, sembla que les condicions que s'aplicaran en aquest cas no seran capaces de produir una degradació significativa, sobretot sabent que aquest material era usat per canonades d'ús residencial. Per tant, una estimació inicial és que, al contrari que en el cas del PLA, el PBT no presentarà degradació en cap dels casos plantejats.

1.3. Conceptes teòrics aplicats

Durant l'elaboració del projecte s'han tingut en compte un seguit de principis als quals cal dedicar un apartat per a la seva explicació. Aquests són l'electrofilat, la degradació enzimàtica i la liofilització.

- **Electrospinning**

La paraula electrospinning es refereix al procediment mitjançant el qual es produeixen fibres a partir de filament elèctricament carregat de solució polimèrica. El diàmetre d'aquestes fibres pot oscil·lar, però sol estar en el rang d'uns cents de nanòmetres. L'esquema bàsic del procés es mostra a la figura següent:

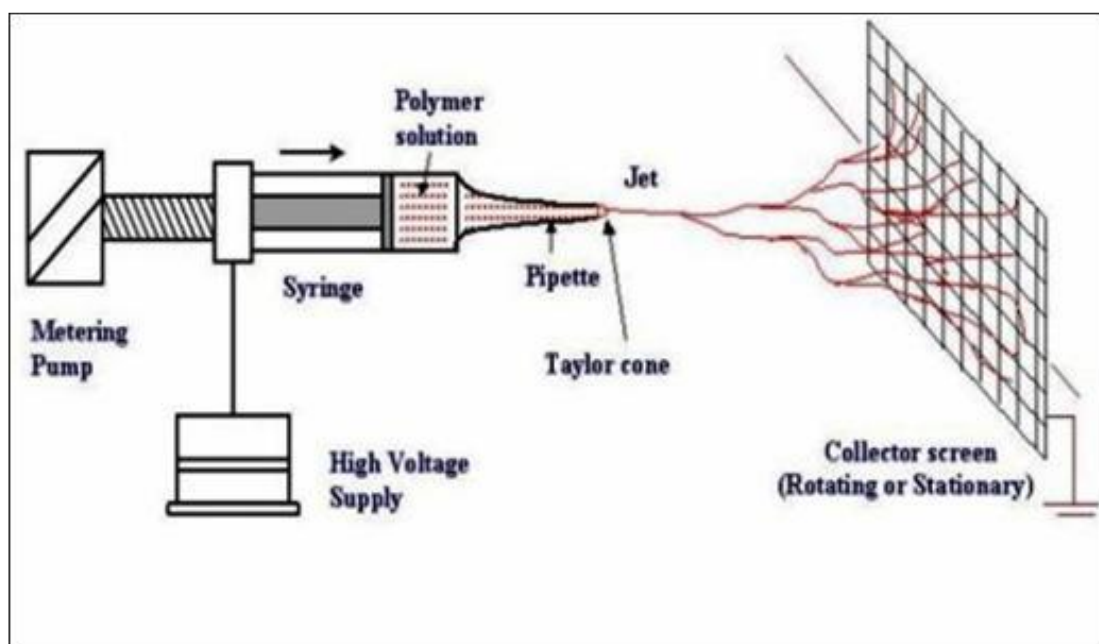


Figura 3. Esquema del procés d'electrospinning (Font: referència [4])

El procediment s'inicia amb l'aplicació d'un camp electrostàtic entre els dos pols oposats existents, que en aquest cas són l'agulla (metàl·lica) i la placa inferior o col·lector on, com el seu nom indica, són recollides les fibres obtingudes.

Inicialment, una xeringa carregada amb la solució polimèrica d'interès s'incorpora a la part superior de la màquina, on hi ha una estructura inert que serveix de punt de suport. Un cop incorporada la xeringa, aquesta s'uneix a la bomba superior, que és la que generarà la pressió que provocarà un flux constant i regular a través de l'agulla de la xeringa. Aquest flux rep l'acció de la polarització i la càrrega elèctrica creada pel camp aplicat i cau cap al col·lector en forma de jet, a una distància d'entre 5 i 30 cm. Durant el recorregut d'aquesta distància, el solvent s'evapora gradualment i el producte es recollit en forma de microfibres.

Al llarg del flux d'aquest jet format per l'efecte del camp, les càrregues afecten el fluid a través de la distància de separació dels elèctrodes provocant una ruptura de la tensió superficial descomponent-se en una tangencial (t) i una normal (n), formant el con de Taylor, com es pot observa a la figura següent:

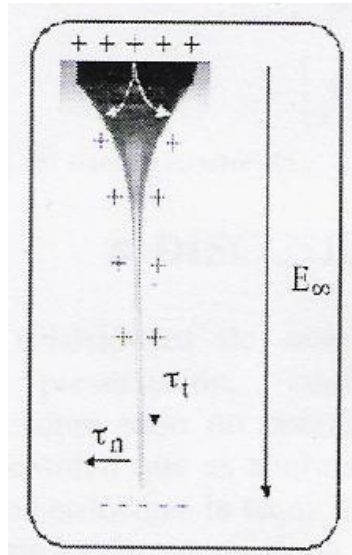


Figura 4. Distribució de càrregues a través del flux (Font: referència [4])

Un cop aquest jet assoleix una acceleració suficient, la magnitud del diàmetre disminueix. Aquest jet se solidifica convertint-se a la fibra i manifestant un corrent de l'ordre de microamperis.

A la punta de l'agulla tenim present una gota subjecta, a través de la qual surt el flux. Aquesta gota es troba subjecta a la punta gràcies a la tensió superficial del líquid, fins que la repulsió entre les càrregues és suficientment fort i provoca una força en sentit contrari, que porta a que aquesta comenci a allargar-se i a formar el con invers (con de Taylor). Aquest procediment d'elongació conclou quan la concentració de càrrega supera a aquesta tensió superficial i es forma un feix. Aquest feix recorre algunes trajectòries inestables que provoquen el seu allargament, reducció de diàmetre i pèrdua del solvent.

L'aplicació de l'electrospinning pot donar com a resultat fibres, gotes (electrospraying) o no donar cap resultat observable. Les condicions per a que es produeixi el cas desitjat s'han d'estudiar prèviament i en alguns casos alguns dels resultats no és possible amb determinats materials. Per això, abans de començar a recollir les fibres que es busquen és necessari fer un estudi buscant les condicions òptimes per a cadascun dels components estudiats.

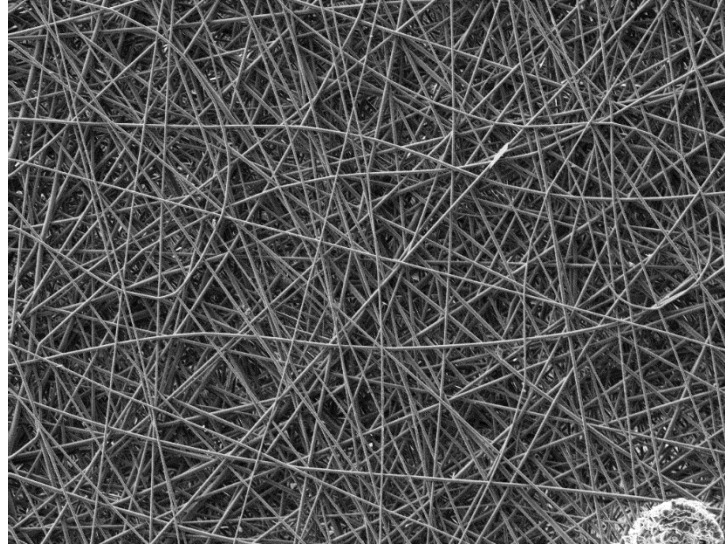


Figura 5. Exemple de fibres obtingudes a través d'electrospinning (Imatge a 1000 augments)

Referent a les variables que influeixen al procés, tenim propietats de diversos tipus que poden tenir efectes directes sobre el resultat final:

En primer lloc, tenim les **variables de control**, aquelles sobre les que els investigadors tenen la capacitat directa de determinar quines condicions específiques volen. Dins aquest categoria trobaríem la velocitat d'abocament (pressió de la bomba), el potencial elèctric aplicat i la distància entre els dos pols.

Per altra banda es tenen les **propietats de la mateixa dissolució polimèrica**, les quals són la viscositat, l'elasticitat, la conductivitat, la tensió superficial i la concentració de polímer en la mateixa.

I per últim, esmentar els **factors ambientals**, dins els quals trobaríem la temperatura ambient i de la solució, la humitat atmosfèrica i la velocitat de pas de l'aire dins la càmera de l'electrospinning (si és dins una vitrina aïllada se suposa que aquest factor és nul).

- **Degradació catalitzada per enzims**

La novetat d'aquest estudi és justament l'addició d'enzims en el procés de degradació dels biopolímers per tal d'accelerar la ruptura dels enllaços que formen el producte inicial, per tant, cal entendre bé l'efecte que aquests enzims poden tenir sobre el procés. En aquest cas, l'enzim usat ha estat la lipasa de pàncrees porcí.

Primer de tot, si volem produir degradació introduïm el biopolímer en aigua. Això és degut a que quan existeix un enllaç èster entre monòmers (com en el cas del PLA), i aquest enllaç pot ser trencat fent-lo reaccionar amb aigua. D'aquesta manera, el següent esquema de reacció:

Ester + aigua \rightarrow àcid + alcohol

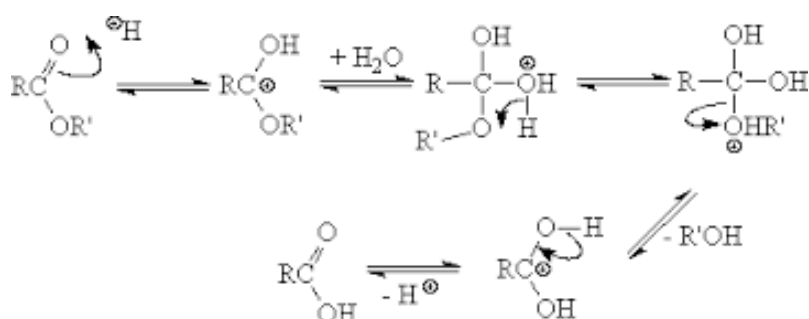


Figura 6. Esquema de ruptura de l'enllaç ester

Aquest procés es produeix de manera espontània, però pot ser accelerat de manera considerable si s'afegeix un enzim com la lipasa, que en el cos humà és la encarregada de catalitzar la hidròlisi de triglicèrids en àcids grassos i glicerol, processos en els quals molècules grans són reduïdes a molècules més petites a través de la ruptura d'enllaços ester en presència d'aigua com es pot observar en la imatge següent.

Figure 4 - Oxidation of triglycerides:

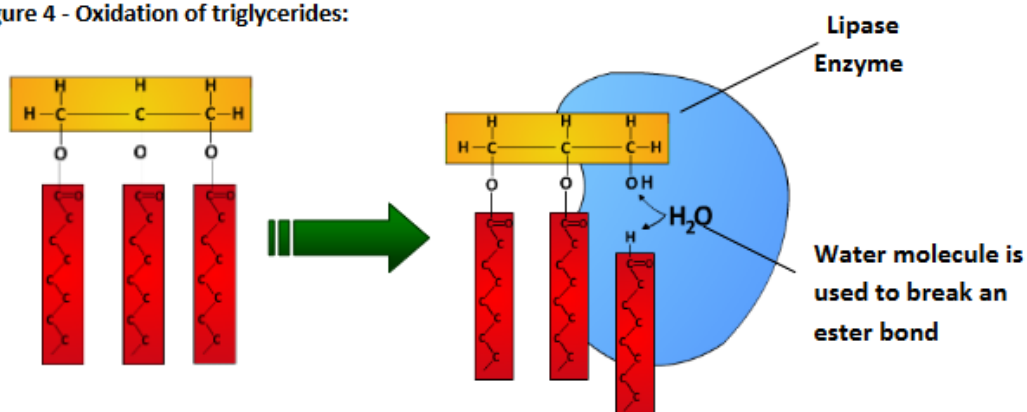


Figura 7. Ruptura d'enllaç ester en presència de lipasa (Font: <https://tinyurl.com/zy83srz>)

La presència de la lipasa ajuda a que aquest procés necessari en el cos humà per a una funció tant bàsica com la obtenció d'energia es produeixi de manera suficientment ràpida a la temperatura estàndard del cos entre 36 i 37 °C, que en cas contrari es produiria de manera molt més lenta.

El procés d'actuació de l'enzim és el següent: la lipasa varia lleugerament la seva forma per encaixar-se amb el substrat i les cadenes d'aminoàcids presents a l'enzim permeten la interacció amb aquest substrat. A mesura que l'enzim varia la seva forma lleugerament, l'energia d'activació del procés es redueix i això provoca l'increment en la velocitat de la reacció. Aquest procés rep el nom de teoria de l'encaix induït dels enzims (il·lustrada en la imatge anterior).

Aquesta funció que provoca la ruptura dels enllaços ester és la que s'espera aplicar en aquest estudi com a mínim en el cas del PLA, ja que els seus monòmers es troben units per enllaços tipus ester, i per això les mostres es mantindran a 36 °C durant el seu temps de degradació.

- **Liofilització**

Es coneix com a liofilització el procediment a través del qual es produeix la deshidratació d'un material, típicament usat en aliments per a millorar les condicions de conserva de les propietats i evitar la proliferació de microorganismes.

La necessitat d'aplicar aquest principi neix de que un cop conclusos els experiments de laboratori amb les mostres recollides, moltes d'elles presentaven un diferencial de pes molt petit, o inclús positiu en alguns casos. Davant aquest succés es va arribar a la conclusió que, degut a la porositat de les mostres dels materials emprats, residus de líquid havien quedat atrapades a l'interior de les fibres. Per tant, es necessitava un mètode per extreure aquestes partícules de líquid que haguessin pogut quedar atrapades.

El procés de liofilització és un procediment que consta de quatre parts: pretractament, congelació, assecat primari i assecat secundari.

El **pretractament** consisteix en qualsevol tractament que s'apliqui al producte previ a la congelació. Això pot incloure qualsevol tipus de procediment que es cregui adequat per a cada cas concret, com per exemple incrementar la concentració del producte.

En el següent pas, es produeix la **congelació** del producte per sota del seu punt triple (mínima temperatura a la qual poden coexistir els diferents possibles estats del producte en qüestió). Això assegura la sublimació en el següent pas, que consisteix en el pas directe d'estat sòlid a estat gas.

Durant l'**assecament primari**, es redueix la pressió el màxim possible i es proporciona calor per provocar la sublimació. Aquesta sublimació es produeix degut a que la temperatura de sublimació és directament proporcional a la pressió present: com menor sigui la pressió, menor seran els punts d'ebullició o sublimació, com es pot observar a la següent taula:

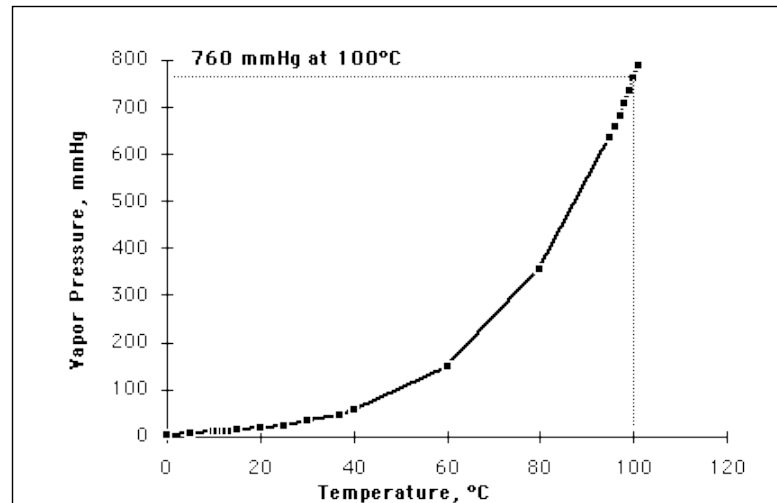


Figura 8. Relació entre la temperatura d'evaporació de l'aigua i la pressió (Font: <https://tinyurl.com/ycyaox3t>)

Durant aquest procés es sol alliberar el producte d'aproximadament el 95% de l'aigua present inicialment en el producte, però s'ha de fer amb cura ja que si es proporciona massa calor l'estructura del material es podria veure alterada (sobretot si parlem d'aliments).

Finalment, durant l'**asseccament secundari** l'objectiu és eliminar les partícules d'aigua que puguin haver quedat sense congelar. En aquest pas, la temperatura s'eleva per sobre de la temperatura de l'asseccament primari per provar d'eliminar qualsevol interacció fisicoquímica que s'hagi pogut produir entre les molècules d'aigua i el producte. Un cop completat el procediment de liofilització és possible que s'hagi eliminat fins un 99% del líquid que inicialment es trobava al producte.

2. Metodologia

Aquest apartat està dedicat a l'explicació del procediment que s'ha dut a terme de cara als experiments realitzats al laboratori, des de l'estudi previ a la preparació de mostres fins a l'obtenció dels resultats finals.

2.1. Explicació procedimental

Sense perdre de vista l'objectiu principal del projecte (estudiar la degradació de PLA i PBT accelerada per enzims), s'ha dissenyat aquest procediment detallat per arribar a les condicions necessàries que permetin portar a terme amb èxit aquest objectiu.

El primer pas necessari és la selecció d'un dissolvent compatible tant amb el biopolímer com amb l'enzim, de manera que cap dels components vegi alterades la seva composició ni la seva activitat. Un cop seleccionat aquest, es procedeix a la preparació de mostres prèvies (ja sigui amb enzim o sense) que seran utilitzades per a l'estudi i determinació de les condicions òptimes per a l'obtenció de la matriu en forma de microfibrilles.

Un cop trobades les condicions òptimes corresponents a cada cas, es prepararà una solució de cada cas d'interès amb suficient quantitat per recollir una matriu de mida considerable, ja que serà d'aquí on es recolliran les mostres amb les quals es realitzarà l'experiment, a més de les mostres que s'usaran per a realitzar l'estudi de propietats més incisiu. Paral·lelament, es prepararà la solució PBS amb les condicions establertes, ja que aquesta solució serà la que actuarà de medi aquós on s'espera que es produirà la degradació del polímer.

En el moment que les diferents matrius dels polímers ens les seves corresponents condicions i la solució aquosa PBS es trobin preparades, es procedirà al retall de la matriu en mostres d'aproximadament 1x1 cm les quals, sense pesades prèviament, seran introduïdes juntament amb la solució PBS en vials (Eppendorfs en aquest cas) i es deixaran en repòs durant el temps assignat a cada mostra (3, 7, 14, 21 o 30 dies).

Quan es compleixi el temps estipulat per a cada grup de mostres, aquestes seran extretes i asseccades mitjançant el procés de liofilització. Un cop acabat l'asseccament, es realitzarà la pesada final de les mostres, amb la que s'espera determinar el grau de degradació que han patit aquestes durant el determinat temps d'exposició que hagin patit. Amb això ja es tindrien els resultats finals i es podria procedir al tractament d'aquests i a la realització de l'estudi i les conclusions pertinents.

2.2. Diagrama de flux

En primer lloc, a forma d'il·lustrar de manera simple i concreta el procediment pas per pas, s'ha procedit a la realització d'un diagrama de flux que es pot trobar a la següent pàgina:

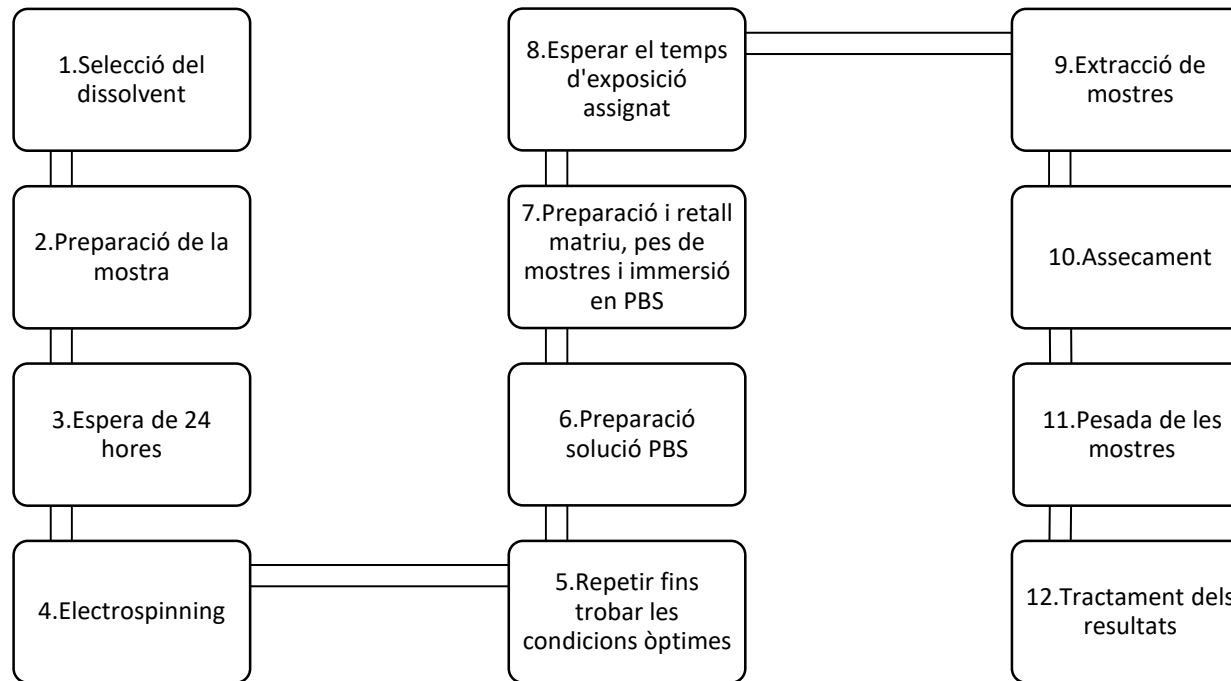


Figura 9. Diagrama de flux del procés

3. Estudi previ

3.1. Determinació de condicions òptimes

Abans d'arribar al punt d'estudi de la degradació de les mostres, cal realitzar un exhaustiu estudi previ que permeti determinar les condicions òptimes de preparació de les esmentades mostres a utilitzar en l'experiment. Per a dur a terme aquesta tasca, s'han preparat un seguit de mostres amb diferents condicions de concentració i amb diferents dissolvent, a les quals seguidament se'ls ha aplicat un tractament a través de l'electrospinning explicat prèviament a diferents condicions de voltatge, pressió i distància entre l'agulla i col·lector. La taula completa amb totes les proves realitzades es pot trobar a l'annex A. Les condicions estimades com a òptimes per al recolliment de la matriu és troben a la taula següent:

Material	Conc. polímer (% en pes)	Conc. enzim (% en pes)	Voltatge (V)	Cabal (mL/h)	Distància (cm)	Diàmetre mig de fibres (μ m)
PLA	9	10	21	5	15	2,1
PBT	9	10	20	5	15	1,7
PLA + enzim	9	10	20	5	15	2,0
PBT + enzim	9	10	20	5	15	1,7

Taula 1. Condicions aplicades en l'electrospinning per al recolliment de les matrius

Com es pot comprovar, les condicions són bastant semblants en tots el casos, cosa que ha facilitat la tasca. En el cas del PLA amb enzim i PBT amb enzim, la concentració d'enzim afegida ha estat d'un 10% respecte la massa del polímer. Després de realitzar algunes proves amb DMC i DMF, l'enzim s'ha afegit a la solució prèviament dissolt amb TFA (àcid trifluoroacètic), ja que els anteriors produïen una reacció que alterava la composició de la mostra. Per consultar les dades de quantitats afegides a les mostres veure annex A.

3.2. Preparació de la solució PBS

Un cop determinades les condicions òptimes de treball per a les fibres en cada cas, cal preparar la solució en la qual s'introduiran les mostres per a que es produeixi la degradació. Aquesta solució és la PBS, altrament coneguda com a tampó fosfat salí.

Els components d'aquesta solució tampó són clorur sòdic, clorur de potassi, fosfat sòdic i fosfat de potassi. La osmolaritat i la concentració de ions que s'aconsegueix amb les proporcions adequades donen el tret distintiu que fa interessant aquesta solució, ja que el medi creat s'assembla molt a les condicions que trobaríem en el líquid extracel·lular dels mamífers. Els grups fosfat s'encarreguen de mantenir estable el pH, mentre que la osmolaritat es manté al mateix nivell que la del cos humà. A més a més, es tracta d'una solució isotònica i no és tòxica per les cèl·lules, fent d'ella el medi ideal per a simular l'aplicació en un cas real dels polímers creats prèviament. A més de tots els components esmentats anteriorment, s'ha afegit també una quantitat molt petita d'azida de sodi, component que s'usa amb una finalitat biocida per tal d'evitar qualsevol proliferació de microorganismes que es pogués produir. Les quantitats usades de cada components es poden trobar a la següent taula:

Quantitat per a 0,5 L de solució		
	Q. Necessària (g)	Q. Abocada (g)
NaCl	4,0035	4,025
KCl	0,1	0,1033
Na ₂ HPO ₄	0,7	0,767
KH ₂ PO ₄	0,1225	0,129
CaCl ₂	0,0278	0,03
NaN ₃	0,15	0,15

Taula 2. Composició de la solució PBS

Un cop aconseguides les proporcions desitjades, cal establir que el pH de la solució es troba entre 7,2 i 7,4 per tal d'assegurar que les condicions a les que es sotmetran les mostres son el més semblants possibles a les del cos humà. Es realitza una comprovació per triplicat i es constata que el pH de la solució obtinguda és de 7,35.

Un cop tenim la seolució desitjada, la separem en dos recipients de 0,25 L. Una de'elles ja es la solució final que s'usarà per als casos on no sigui necessària la inclusió de l'enzim en solució. A la segona se li afegeixen 1,5 g de lipasa per a posteriorment poder establir si la presència de l'enzim en el medi propicia o no la degradació millor que si aquesta es troba incorporada de forma directa a les fibres del polímer.

3.3. Preparació mostres i disseny de l'estudi

Un cop establertes les condicions òptimes de les fibres i de la solució PBS a emprar, es procedirà a recollir les matrius de biopolímer d'interès, assegurant que la quantitat sigui suficient com per a poder tenir una massa de mostra significativa en cada cas.

L'estudi s'ha dissenyat de la següent manera: partint dels dos polímer amb els quals es treballa (PLA i PBT), es preparen 3 escenaris per a cadascun d'aquests material. En el primer experiment, s'introduirà una mostra de polímer en la solució PBS sense enzim. Aquest seria l'experiment de referència, en que es comprovaria quin grau de degradació es produiria si no tinguéssim l'acció de cap enzim durant el procés. En el segon experiment, el polímer s'introduirà en la solució PBS a la que prèviament se li va incorporar enzim en dissolució. En el darrer cas, el polímer amb l'enzim incorporat a les seves fibres s'introduirà a la solució PBS original. Per a poder estudiar la degradació en funció del temps, per a cadascun d'aquests casos es prepararan un total de 25 mostres (150 en total, ja que tenim 6 casos diferents) i a cada interval de temps (3, 7, 14, 21 i 30 dies) 5 d'elles seran retirades i es procedirà a establir la mitjana de degradació entre elles. La mesura de pes es realitzarà tant abans de la seva introducció en la solució com en acabar tot el procediment, d'aquesta manera es podrà obtenir un diferencial que ens donarà una idea del grau de degradació produït en funció del temps d'exposició. La massa de cadascuna de les mostres, per a poder considerar que té un pes significatiu no pot ser més baix de 20 mg.

Un cop les 150 mostres estan submergides en les seves respectives solucions, s'introdueixen a l'agitador del laboratori i s'assegura que la temperatura es manté al voltant dels 36-37°C, temperatura en la que l'enzim té el major grau d'activitat (temperatura del cos humà).

3.4. Procés d'assecat

- **Assecament en estufa**

En primer lloc, al extreure el líquid de les mostres s'ha procedit a deixar aquestes en estufa a uns 40 °C durant 48 hores. L'equip usat es pot veure a continuació:



Figura 10. Estufa usada en primera instància per l'assecament

La pèrdua de pes de les mostres s'ha considerat insuficient, ja que algunes d'elles presentaven diferencials molt petits o inclús augments de pes. Això s'atribueix a que la xarxa de fibres havia absorbit més aigua de la que s'ha pogut extreure amb aquest procés. Els resultats obtinguts amb aquest procés es poden observar a les taules que es presenten a l'apartat de resultats.

- **Assecament al buit**

A continuació, s'ha procedit a un procés d'assecament al buit, per tal de reduir el punt d'evaporació de l'aigua. Aquest procés es va deixar en marxa durant tot un mes sencer a 45 °C. L'equip usat es presenta a continuació:



Figura 11. Estufa de buit usada per l'assecament

Com es va comprovar al extreure les mostres, aquest procés no va tenir cap efecte consistent sobre les mostres, ja que en la majoria de casos els pesos es van mantenir igual que abans de ser introduïdes a la màquina.

- **Liofilització**

Per provar de millorar el rendiment del procediment, es va procedir a congelar les mostres abans de ser introduïdes una altra vegada a la màquina de buit durant 48 hores més. En aquest cas, si que es va aconseguir reduir considerablement el volum de líquid retengut a les mostres i es van donar els diferencials obtinguts per bons. Els resultats es poden observar a les taules que es presenten en l'apartat de resultats.

4. Resultats

Un cop finalitzat l'experiment, s'ha procedit a la quantificació del grau de degradació en cada cas i a la representació d'aquesta. En aquest apartat s'estudiaran els resultats en els 6 diferents casos proposats.

4.1. PLA en PBS (sense enzim)

Aquest és el cas més bàsic per al cas del PLA. Amb aquest experiment es pretenia observar quin grau de degradació es produiria en el PLA de manera natural si no s'introduïa l'acció de cap enzim. A continuació es pot observar l'aspecte que presentava la xarxa de fibres abans de la seva immersió de la solució:

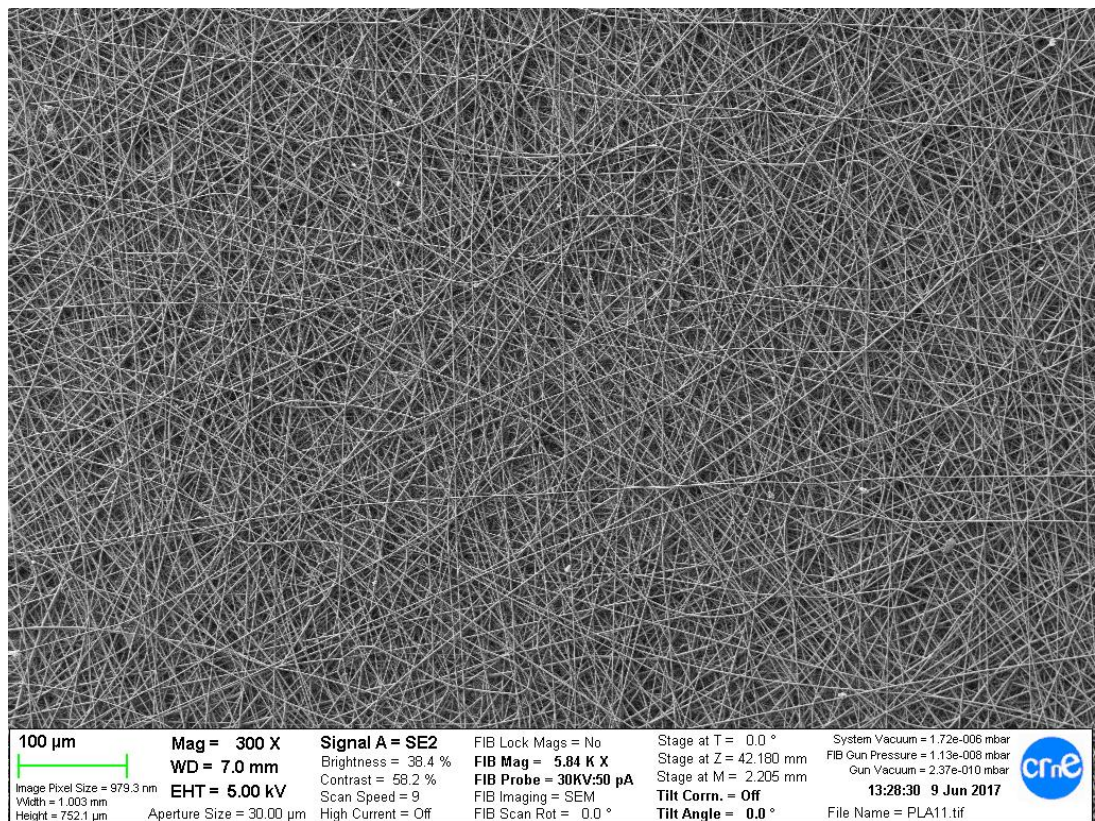


Figura 12. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA a 300 augments.

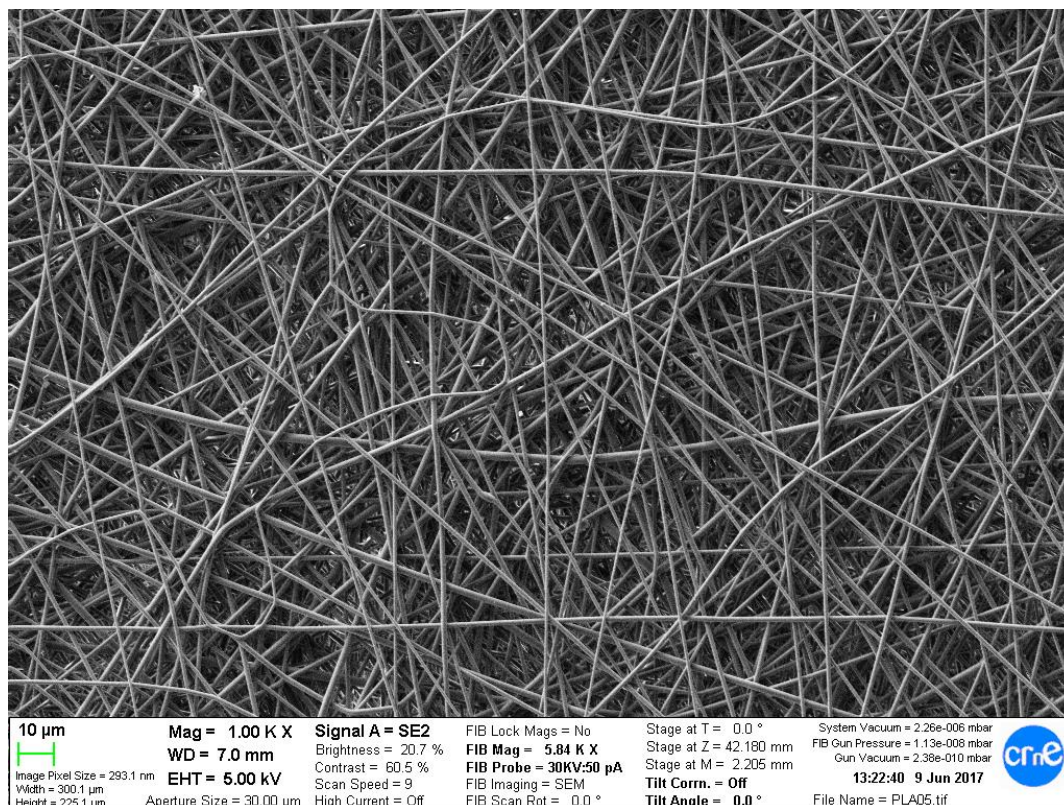


Figura 13. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA a 1000 augments.

Com es pot comprovar, la xarxa de fibres presenta un aspecte general de compactació i de gruix regular, tot i que queda clara la naturalesa porosa d'aquestes xarxes degut a l'espai que es produeix entre les fibres.

A continuació es presenta la taula amb els resultats obtinguts per a aquest cas:

CODI	PES SEC (mg)	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	Pes (mg)	Grau degradació	Mitjana
1	21,4	3	20,1	19,7	7,94%	4,00%
2	24,2		24,1	23,5	2,89%	
3	20,3		19,6	19,6	1,48%	
4	19,5		18,6	18,4	5,64%	
5	24,3		23,8	23,8	2,06%	
6	28,8	7	28,2	28,0	2,78%	2,30%
7	23,4		23,4	23,4	0,00%	
8	28,3		28,0	27,6	2,47%	
9	20,2		19,7	19,5	3,47%	
10	21,7		21,5	21,1	2,76%	
11	21,6	14	21,5	21,1	2,31%	1,91%
12	21,2		21,6	21,6	-1,89%	
13	23,2		23,1	23,1	0,43%	
14	30,4		29,6	29,5	2,96%	
15	20,5		20,2	20,1	1,95%	
16	25,0	21	24,6	24,6	1,60%	2,98%
17	28,6		28,5	28,5	0,35%	
18	25,8		24,9	24,7	4,26%	
19	31,6		30,4	30,1	4,75%	
20	25,3		24,9	24,3	3,95%	
21	23,5	30	23,2	23,0	2,13%	2,45%
22	25,3		24,6	24,2	4,35%	
23	24,5		24,3	24,3	0,82%	
24	25,3		24,4	24,4	3,56%	
25	28,2		28,1	27,8	1,42%	

Taula 3. Degradació corresponent al PLA (sense acció enzimàtica)

Tal com es pot observar, a la taula apareixen dos columnes referents al pes posterior a l'experiència. La primera correspon al pes obtingut abans d'aplicar el procés de liofilització, mentre que la segona és el pes corresponent un cop aplicat aquest procediment. La diferència entre un i altre en aquest cas en concret no és gaire significativa (diferències menors a 1 mg), però si més no si que es comprova que aquest procediment té efecte sobre les mostres. A més a més, un dels resultats dona un diferencial de pes negatiu (marcat en vermell i ressaltat en negreta). Aquest tipus de resultats no s'han tingut en compte a l'hora de calcular les mitjanes finals i s'han atribuït a un error de càlcul.

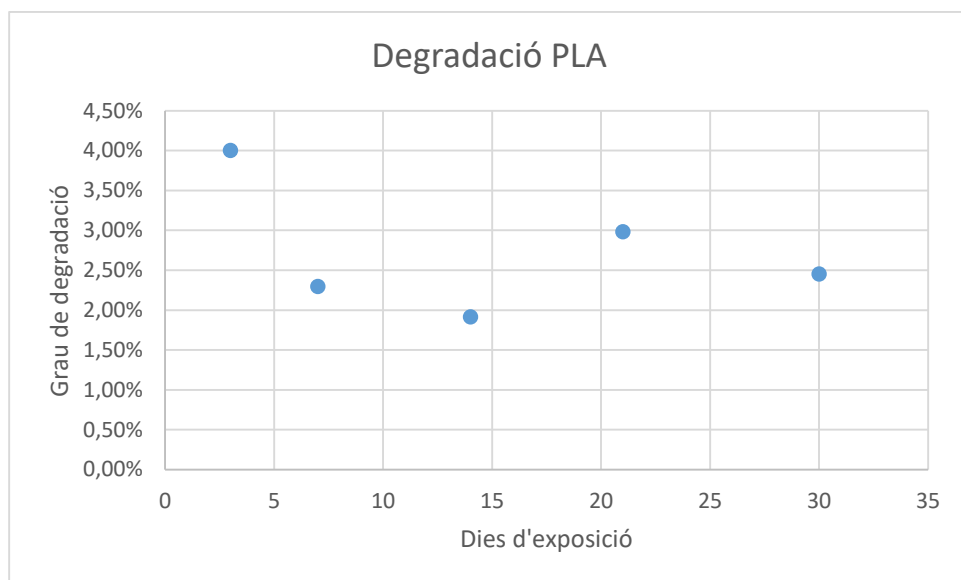


Figura 14. Representació de la degradació obtinguda

Observant els resultats es pot comprovar que el grau de degradació obtingut per al PLA al llarg de 30 dies no segueix cap progressió significativa i a més els resultats oscil·len de manera que és impossible realitzar un seguiment de degradació en funció del temps. Això és degut a que el temps de degradació d'aquest polímer és molt superior al temps d'estudi. Segons les fonts consultades, la degradació de manera natural del PLA pot arribar a tardar fins a 24 mesos, mentre que aquest estudi s'ha portat a terme durant només 1 mes.

4.2. PLA en PBS amb enzim en dissolució

Per a aquest cas, les fibres emprades son les mateixes que en el cas anterior, ja que la diferència recau en la solució emprada. En aquesta part de l'estudi s'ha usat la solució PBS amb enzim dissolt en ella. A continuació es presenta la taula amb els resultats obtinguts:

CODI	PES SEC (g)	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	Pes (mg)	Grau degradació	Mitjana
1i	21,2	3	21,0	19,7	7,08%	4,32%
2i	27,7		27,7	26,5	4,33%	
3i	29,9		31,9	30,2	-1,00%	
4i	23,3		24,7	23,0	1,29%	
5i	28,4		28,4	27,1	4,58%	
6i	26,6	7	26,2	24,9	6,39%	6,55%
7i	21,6		21,8	20,3	6,02%	
8i	20,1		20,3	18,6	7,46%	
9i	22,1		22,2	20,7	6,33%	
10i	23,0		23,2	21,5	6,52%	
11i	21,6	14	22,5	21,3	1,39%	6,10%
12i	21,8		22,5	21,4	1,83%	
13i	29,2		28,8	27,5	5,82%	
14i	24,6		22,5	21,4	13,01%	
15i	22,5		21,8	20,6	8,44%	
16i	27,9	21	27,0	25,4	8,96%	8,94%
17i	31,3		29,5	28,3	9,58%	
18i	33,4		31,7	30,2	9,58%	
19i	21,2		20,5	19,1	9,91%	
20i	28,5		28,3	26,6	6,67%	
21i	30,0	30	28,5	27,3	9,00%	9,49%
22i	25,2		24,0	22,9	9,13%	
23i	29,4		26,6	25,9	11,90%	
24i	25,1		23,7	22,6	9,96%	
25i	33,5		32,3	31,0	7,46%	

Taula 4. Degradació corresponent al PLA en medi enzimàtic

Segons els resultats obtinguts en aquest cas, podem comprovar com el procés d'assecatment per liofilització ha tingut un major efecte en aquest cas (diferències superiors a 1 mg) i la degradació s'accentua.

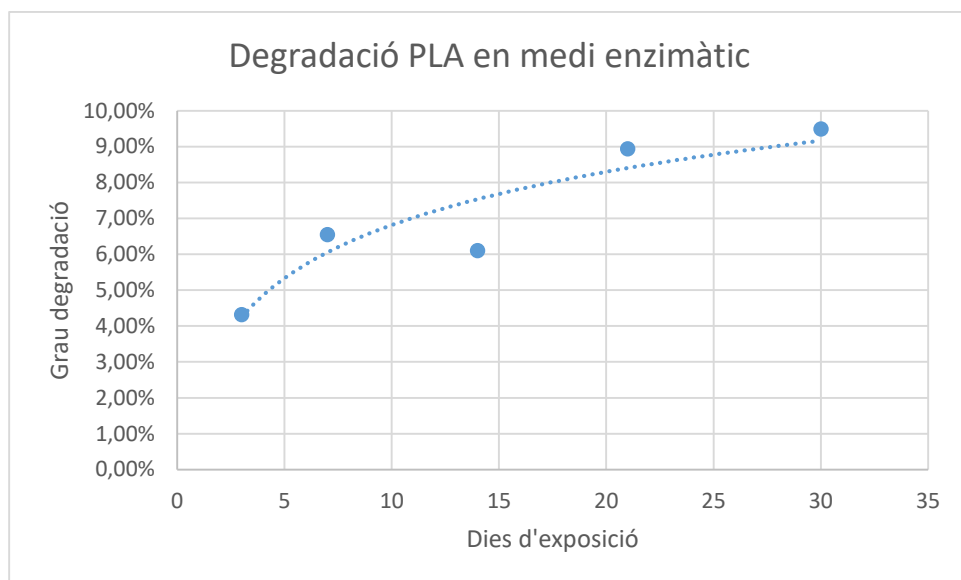


Figura 15. Representació de la degradació obtinguda.

Tal com s'esperava, la inclusió de l'enzim en el medi fa que observem una degradació superior en aquest cas i inclús que es pugui observar una progressió en aquesta degradació, tot i que la tendència segueix sense sortir perfecta, probablement degut a que el temps d'exposició total podria haver estat massa baix.

4.3. PLA amb enzim incorporat a les fibres en PBS

En aquest cas s'ha utilitzat la solució PBS inicial (sense enzim dissolt) i la diferència es troba en que l'enzim ha estat incorporat a l'interior de les fibres en el moment de la producció de la xarxa a través de l'electrospinning. A continuació es presenta l'estat de les fibres abans de l'experiment:

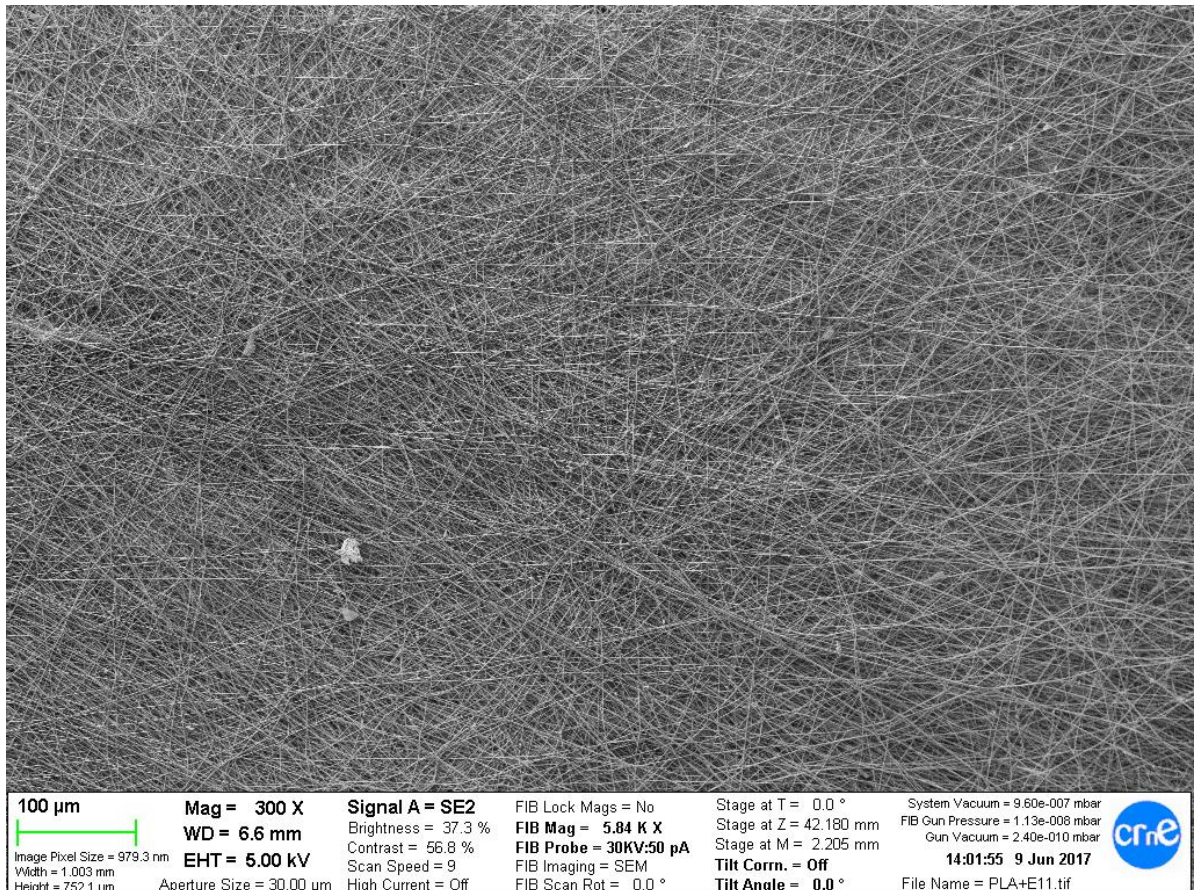


Figura 16. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA amb enzim a 300 augments

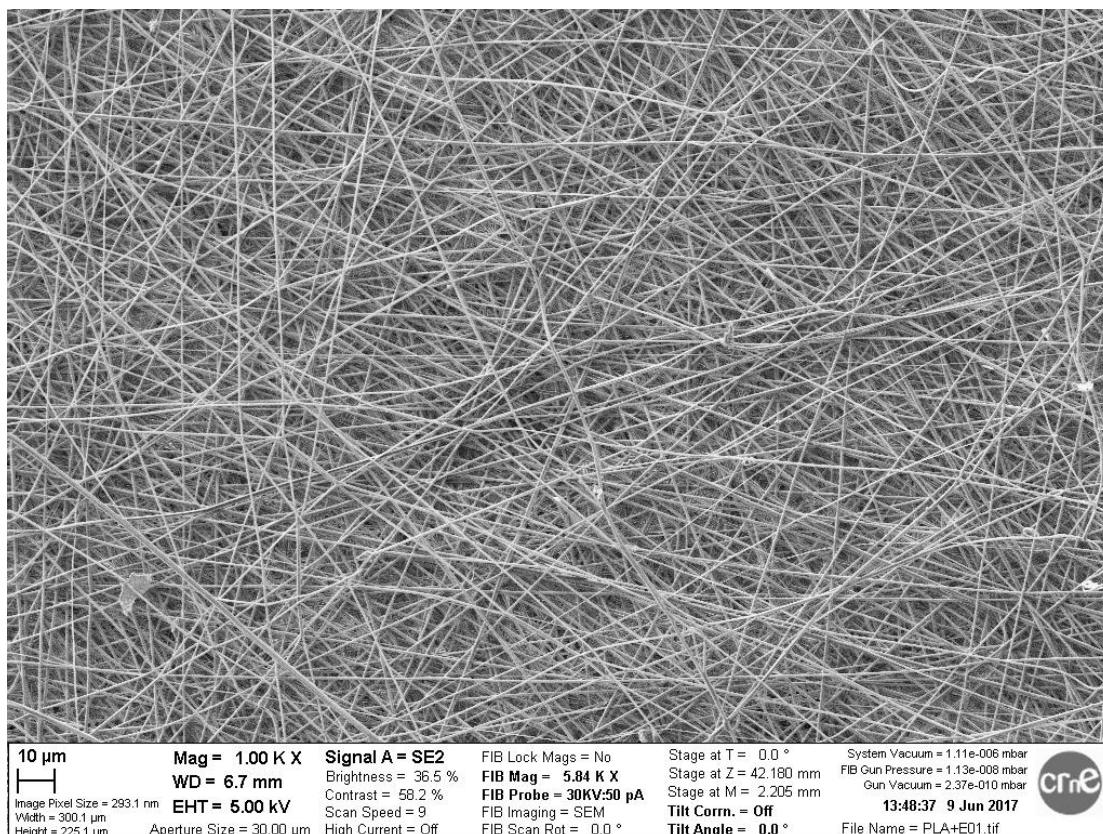


Figura 17. Aspecte de la xarxa de fibres de PLA amb enzim a 1000 augments

Al igual que en el cas anterior, es pot observar la compactació de les fibres i la regularitat del gruix d'aquestes, tot i que són més visibles alguns defectes presents a la xarxa. Això pot ser degut a que algunes partícules d'enzim no hagin quedat ben dissoltes o que la assimilació per part de les fibres no hagi estat completa.

A continuació es presenta la taula amb els resultats obtinguts:

CODI	PES SEC	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	Pes (mg)	Grau degradació	Mitjana
1A	29,7	3	29,5	28,5	4,04%	2,04%
2A	22,1		23,0	22,0	0,45%	
3A	23,7		25,3	24,0	-1,27%	
4A	29,8		30,0	28,6	4,03%	
5A	23,8		24,2	23,1	2,94%	
6A	20,7	7	21,3	20,3	1,93%	2,54%
7A	24,7		26,8	25,5	-3,24%	
8A	22,4		29,9	21,8	2,68%	
9A	29,2		28,8	27,7	5,14%	
10A	23,8		24,7	23,7	0,42%	
11A	30,1	14	29,2	28,2	6,31%	2,69%
12A	25,2		25,6	24,0	4,76%	
13A	24,5		25,0	24,0	2,04%	
14A	21,4		22,9	21,9	-2,34%	
15A	21,7		-	-	-	
16A	22,7	21	23,7	22,6	0,44%	3,65%
17A	23,7		23,4	22,4	5,49%	
18A	25,2		26,1	25,1	0,40%	
19A	22,9		22,9	21,9	4,37%	
20A	23,8		23,9	22,0	7,56%	
21A	22,6	30	23,1	22,1	2,21%	4,39%
22A	22,6		23,2	22,2	1,77%	
23A	23,2		22,9	21,8	6,03%	
24A	24,7		24,1	22,9	7,29%	
25A	34,6		34,1	33,0	4,62%	

Taula 5. Degradació corresponent al PLA amb enzim incorporat

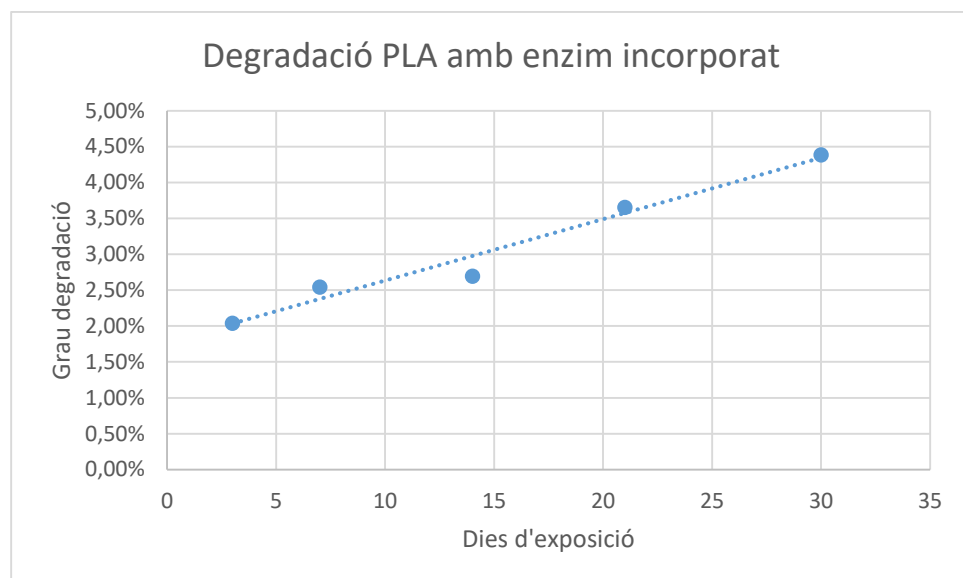


Figura 18. Representació de la degradació obtinguda

Queda clar observant tant la taula com el gràfic que la degradació en aquest ha sigut menor que en el cas anterior en que teníem l'enzim dissolt en el medi, però tot i així s'observa cert grau de degradació progressiva.

4.4. PBT en PBS (sense enzim)

En aquest cas s'introdueixen les fibres del segon polímer (PBT) en la solució PBS sense enzim present en cap forma. L'aspecte que presentaven les fibres al començament del procediment es poden veure a continuació:

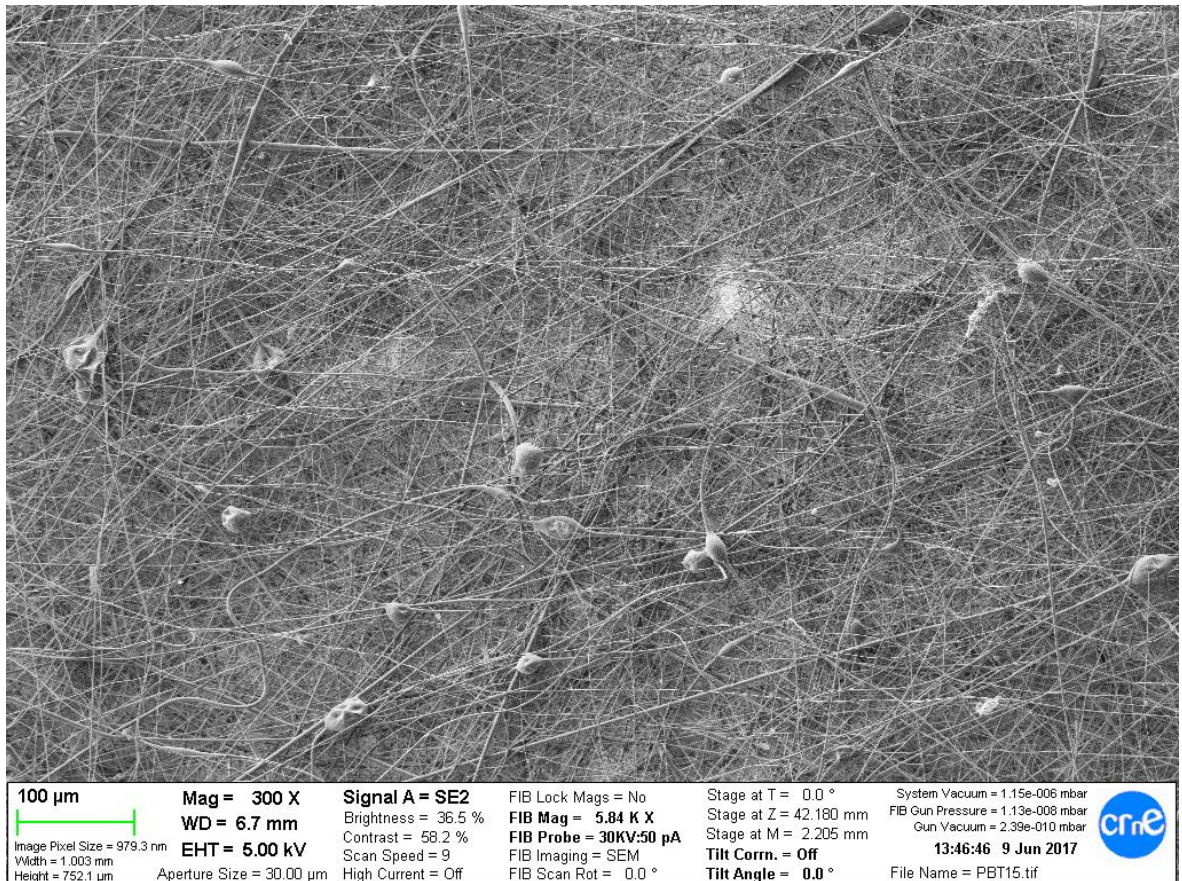


Figura 19. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT a 300 augments

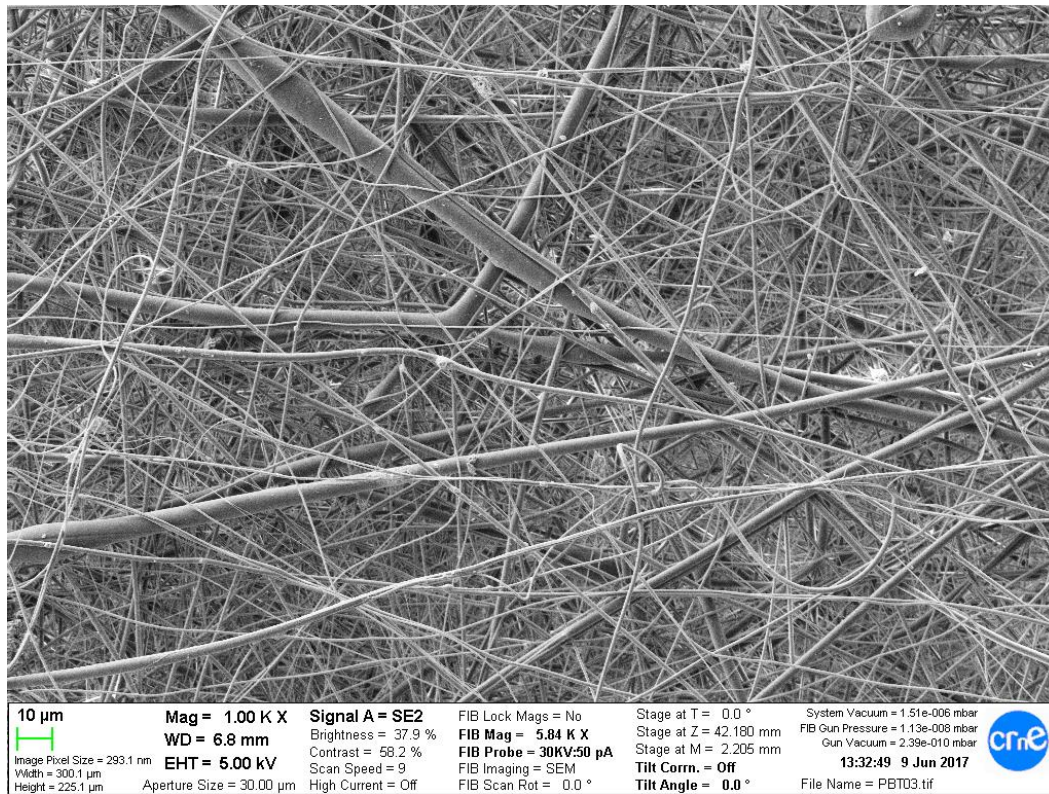


Figura 20. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT a 1000 augments

Tal com es pot observar, aquesta xarxa de fibres no presenta un aspecte tant compacte com en el cas del PLA i es detecten bastantes més irregularitats en la seva composició. El gruix de fibres té molta més variabilitat i sembla que queden petites partícules de dissolvent que no han acabat d'evaporar-se bé durant el procés d'electrospinning (veure figura 16).

A continuació es presenta la taula amb les dades obtingudes:

CODI	PES SEC	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	PES (mg)	Grau degradació	Mitja
26	26,7	3	28,4	27,3	-2,25%	2,02%
27	23,1		23,1	22,8	1,30%	
28	22,1		22,8	21,6	2,26%	
29	20,8		21,2	20,3	2,40%	
30	23,8		24,5	23,3	2,10%	
31	30,7	7	30,1	29,1	5,21%	3,52%
32	28,3		27,9	26,9	4,95%	
33	22,4		22,1	21,1	5,80%	
34	31,8		32,8	31,7	0,31%	
35	23,0		23,7	22,7	1,30%	
36	21,6	14	21,8	20,8	3,70%	1,63%
37	27,2		28,3	27,2	0,00%	
38	31,3		32,5	31,5	-0,64%	
39	25,6		26,3	25,3	1,17%	
40	20,0		21,3	20,1	-0,50%	
41	29,6	21	30,6	29,3	1,01%	1,41%
42	22,4		23,2	22,2	0,89%	
43	21,6		22,9	21,9	-1,39%	
44	21,4		21,8	20,7	3,27%	
45	21,9		23,1	21,8	0,46%	
46	24,6	30	25,6	24,6	0,00%	1,60%
47	24,5		25,3	24,3	0,82%	
48	24,1		25,4	24,1	0,00%	
49	29,3		30,6	29,6	-1,02%	
50	23,2		22,9	21,9	5,60%	

Taula 6. Degradació corresponents al PBT

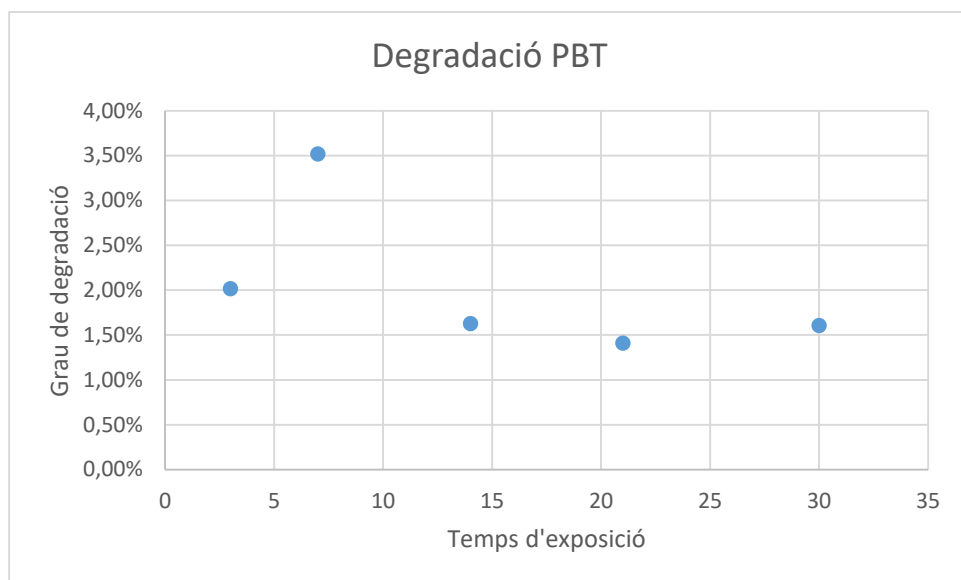


Figura 21. Representació de la degradació obtinguda

Un cop obtinguts els resultats corresponents, s'observa que la degradació pren magnituds molt petites i no té cap tipus de progressió significativa. De fet, algunes de les mostres estudiades no semblen haver patit un grau de degradació significatiu. Com ja s'ha explicat amb anterioritat, el PBT presenta una resistència a la degradació superior a la del PLA, sent usat per aplicacions d'aïllament elèctric entre d'altres. Per això es possible pensar que el procediment aplicat hagi pogut no provocar gaire efecte sobre les mostres.

4.5. PBT en PBS amb enzim en dissolució

Seguint les mateixes pautes que amb el polímer anterior, en aquest cas les fibres usades son les mateixes que en el cas anterior, i la diferència radica en que en aquesta ocasió s'incorpora enzim dissolt a la matriu per veure l'efecte provocat. A continuació es presenta la taula amb els resultats:

CODI	PES SEC (mg)	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	Pes (mg)	Grau degradació	Mitja
26i	25,8	3	32,4	31,8	-23,26%	-22,92%
27i	20,2		23,7	23,4	-15,84%	
28i	22,8		29,0	28,4	-24,56%	
29i	20,4		25,7	25,3	-24,02%	
30i	30,1		38,9	38,2	-26,91%	
31i	24,5	7	32,8	32,5	-32,65%	-27,70%
32i	25,0		29,4	29,4	-17,6%	
33i	23,6		32,6	32,3	-36,86%	
34i	22,7		27,9	27,5	-21,14%	
35i	21,5		28,1	28,0	-30,23%	
36i	22,1	14	28,8	28,8	-30,32%	-29,33%
37i	24,4		31,2	31,2	-27,87%	
38i	20,1		26,2	26,2	-30,35%	
39i	23,1		30,1	30,0	-29,87%	
40i	25,5		32,7	32,7	-28,23%	
41i	29,4	21	37,0	36,7	-24,83%	-27,81%
42i	21,7		28,5	28,5	-31,34%	
43i	30,7		40,0	39,5	-28,66%	
44i	23,4		30,2	29,7	-26,92%	
45i	28,6		37,0	36,4	-27,27%	
46i	23,4	30	28,4	28,4	-21,37%	-22,30%
47i	28,7		34,8	34,8	-21,25%	
48i	30,3		37,5	37,3	-23,10%	
49i	27,8		35,0	34,9	-25,54%	
50i	34,6		41,6	41,6	-20,23%	

Taula 7. Degradació corresponent al PBT en medi enzimàtic

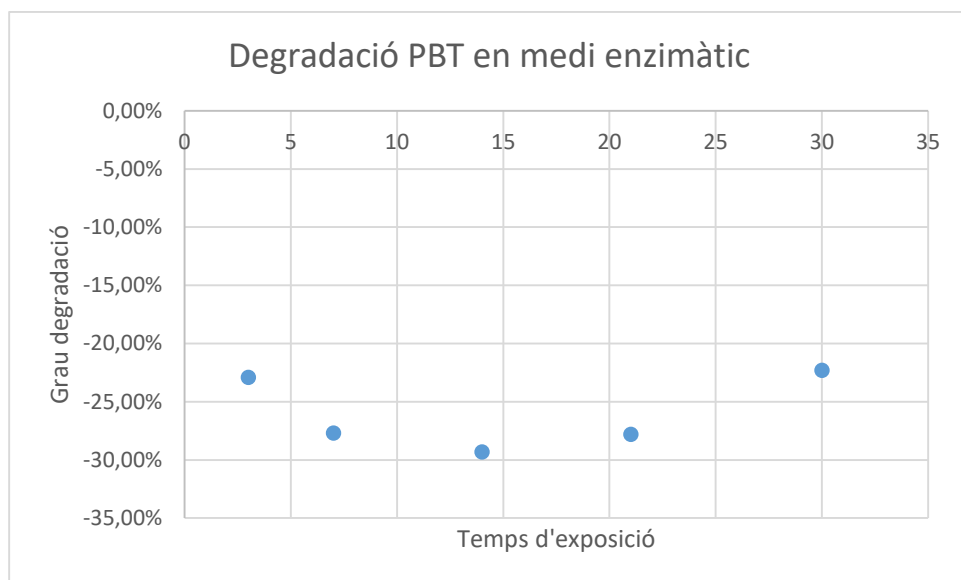


Figura 22. Representació de la degradació obtinguda

Els resultats obtinguts en aquest cas són sorprenentment singulars, i certament no es pot extreure cap conclusió vinculant d'ells. Com es pot observar, després d'aplicar el mateix procediment que en tots els casos anteriors, totes les mostres presenten un augment de pes molt considerable (la majoria d'elles d'entre el 20 i 30 %). Això fa pensar que degut a la major porositat que presentaven les fibres, s'han absorbit grans quantitats d'aigua que no han pogut ser eliminades a través del procés de liofilització, tot i aquesta aquest no sembla ser el cas, ja que si ho fos s'haurien obtingut gradients negatius en els altres estudis amb PBT. A més a més, les mostres presentaven un aspecte groguenc al ser extretes de la matriu, i això porta a pensar que partícules d'enzim que no devien estar ben dissoltes s'han dipositat entre les fibres, provocant aquests augments de pes tant abruptes en elles.

4.6. PBT amb enzim incorporat a les fibres en PBS

Pes últim, tenim el cas en que l'enzim s'ha incorporat a les fibres directament mitjançant una dissolució prèvia. A continuació es mostra l'aspecte que tenien les fibres al moment de començar l'estudi:

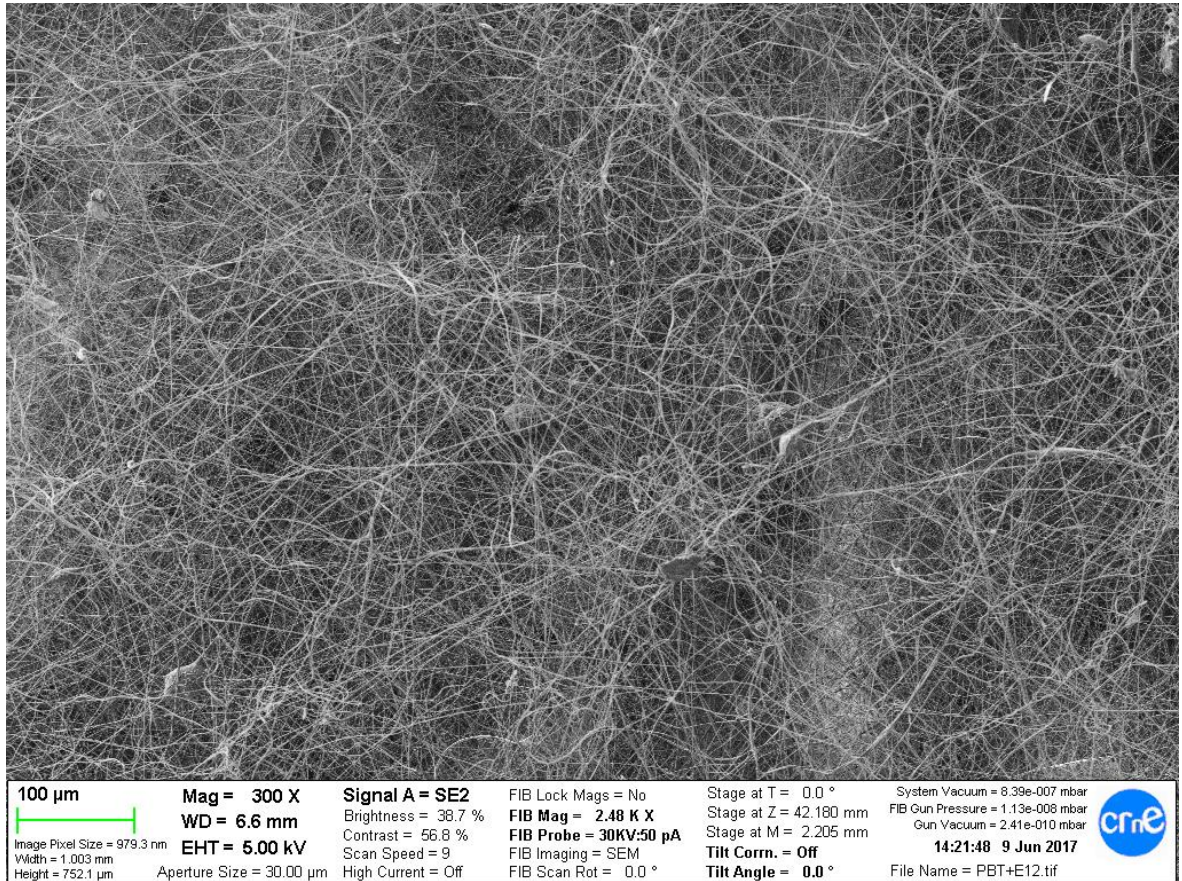


Figura 23. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT amb enzim a 300 aguments

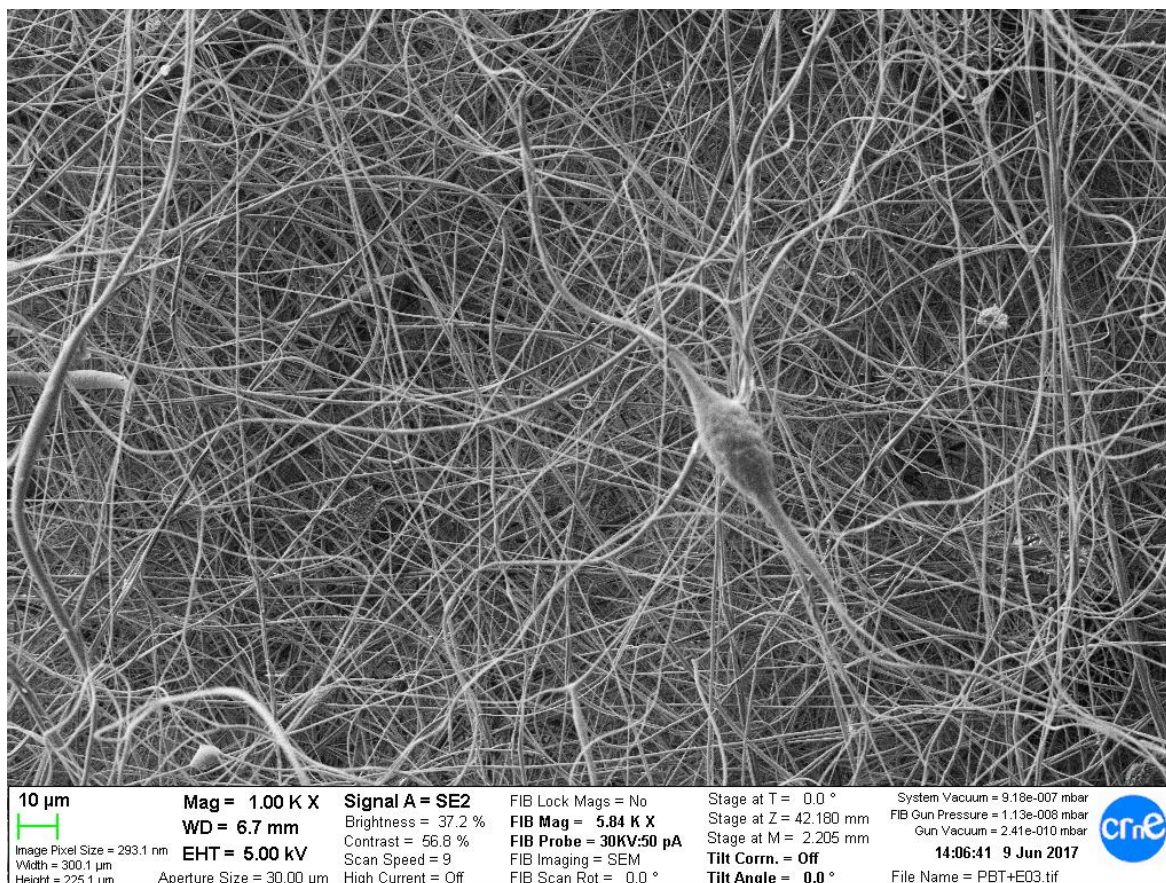


Figura 24. Aspecte de la xarxa de fibres de PBT amb enzim a 1000 augments

L'aspecte observat s'assembla al de les fibres de PBT sense enzim, tot i que la irregularitat en el gruix de les fibres sembla haver-se reduït. De totes maneres, es segueixen observant imperfeccions i les formes que adopten les fibres segueixen presentant un aspecte més aleatori que en el cas del PLA.

A continuació es presenta la taula amb els resultats obtinguts:

CODI	PES SEC	EXTRACCIÓ (dies)	PES (mg)	Pes (mg)	Grau degradació	Mitja
26B	31,8	3	33,0	32,0	-0,63%	-3,05%
27B	22,4		24,6	23,5	-4,91%	
28B	22,9		25,1	23,9	-4,37%	
30B	30,7		32,8	31,4	-2,28%	
32B	20,9	7	22,6	21,2	-1,44%	-3,19%
33B	22,5		25,0	24,0	-6,67%	
34B	24,8		26,0	25,0	-0,81%	
35B	23,4		25,4	24,3	-3,85%	
36B	23,2	14	24,9	23,9	-3,02%	-1,98%
37B	23,5		24,8	23,8	-1,28%	
39B	29,2		30,3	29,3	-0,34%	
40B	24,3		26,1	25,1	-3,29%	
41B	25,5	21	28,0	27,0	-5,88%	-5,35%
42B	24,2		26,4	25,4	-4,96%	
43B	21,4		23,2	22,2	-3,74%	
44B	19,5		21,4	20,4	-4,62%	
45B	23,9		26,8	25,7	-7,53%	
46B	19,8	30	20,3	19,3	2,53%	0,22%
47B	23,2		21,7	20,7	10,78%	
48B	24,5		25,5	24,5	0,00%	
49B	21,9		23,6	22,6	-3,20%	
50B	25,9		26,6	25,5	1,54%	

Taula 8. Degradació corresponent al PBT amb enzim incorporat

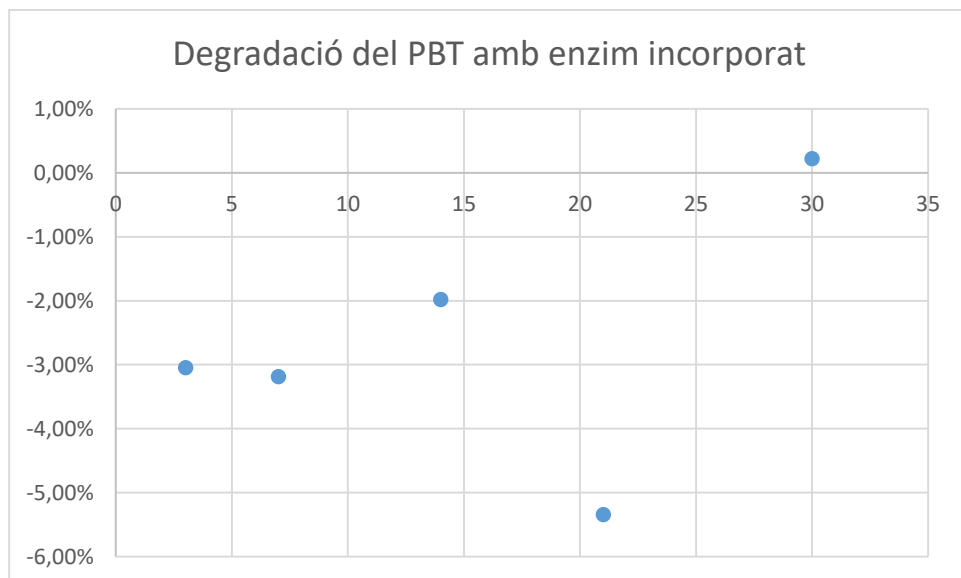


Figura 25. Representació dels resultats obtinguts

En aquest cas, també s'obtenen diferencials de pes negatius, però de molt menor magnitud que en el cas anterior, i queda clar que no existeix cap tipus de progressió gradual de la degradació (com es pot observar en el gràfic). Aquests petits diferencials s'atribueixen a l'aigua que no ha pogut ser eliminada amb el procés de degradació. Així doncs, es pot assumir que aparentment el procés de degradació no ha tingut cap efecte apreciable en la degradació de les mostres.

Conclusions

Un cop finalitzats tots els experiments dissenyats i obtinguts els resultats, cal fer un anàlisi d'aquests. En primer lloc, referent a establir les condicions òptimes de producció de les diverses xarxes de fibres necessàries, les condicions aplicades son les que van donar millors resultats al laboratori després de moltes proves insatisfactòries. La llista completa d'aquestes proves es pot trobar a l'annex A. En el cas del PLA, observant l'aspecte que presenta la xarxa al microscopi electrònic sembla haver-se assolit aquest objectiu, ja que les fibres presenten compactació i regularitat en el gruix, cosa que assegura la igualtat de propietats al llarg de tota la mostra. Per altra banda, en el cas del PBT aquest fet no sembla tant obvi. És veritat que les condicions aplicades son les que es van considerar com a òptimes, però l'aspecte poc regular que presenten les fibres i la variabilitat al llarg de la mostra fa dubtar que aquestes siguin les millors condicions. Ara bé, que una millora d'aquestes condicions sigui possible a través les procediments establerts en aquest estudi és altament improbable, ja que es van realitzar moltes proves prèvies en canvis en la concentració i en les diferents condicions d'operació a l'electrospinning.

Referent al resultats obtinguts en quant a degradació provocada en el PLA, no s'ha pogut establir una progressió en la degradació quan l'enzim no es trobava present de cap manera. Això corrobora les assumpcions prèvies de que la degradació seria molt baixa o inexistent, ja que segons les fonts consultades, el temps de degradació del PLA pot arribar a ocupar un temps de 2 anys. En canvi, amb l'enzim present si que s'ha pogut establir una progressió en aquesta degradació, de manera més marcada quan l'enzim es trobava dissolt en el medi. Sembla evident doncs, que en dissolució l'enzim ha funcionat d'una manera semblant a la que es descriu a l'apartat de degradació enzimàtica, i que aquest mètode és molt més efectiu que la incorporació directa d'enzim a les fibres mitjançant una dissolució prèvia.

Per altra banda, en el cas del PBT tenim resultats diferents. Si ometem el cas en que l'enzim es trobava en dissolució (on els diferencials de pes es disparen), els resultats en els altres dos casos (sense enzim i enzim present en les fibres) son bastant semblants. En ambdós casos no es pot establir una progressió en la degradació de les fibres i aquesta sembla assolir un grau molt petit, o fins i tot inexistent. Aquest fet es pot explicar tenint en compte la major resistència que presenta el PBT a ser degradat, inclús en medis aquosos. Tal com s'ha esmentat amb anterioritat, durant un temps el PBT va ser usat en el recobriment de canonades residencials, fet que serveix per donar una idea de perquè no s'esperava degradació en aquest cas.

Per últim, queda aclarir a que es deu la diferència d'actuació de l'enzim en cada cas. Si assolim doncs, que aquest enzim ha pogut accentuar la degradació en el PLA però no ha tingut cap efecte en el cas del PBT, és evident que hi ha alguna diferència estructural clau responsable d'aquest efecte. Si recordem la manera en que es produeix la degradació del PLA, aquesta es donava en presència d'aigua degut a que aquesta reaccionava amb l'enllaç ester que uneix els monòmers que el conformen. L'enzim actuava com a catalitzador d'aquest procediment, provocant un increment considerable en la velocitat de reacció. Per aquest fet expliquem la diferència en les velocitats de degradació en cada cas del PLA. Però en el cas del PBT, l'enllaç que uneix els seus monòmers es un enllaç èter, no ester. Això impedeix l'atac de l'aigua, impeding la degradació de la seva estructura i ignorant per complet la presència de l'enzim.

Avaluació econòmica

A continuació es presenta un anàlisi detallat del cost total de la realització d'aquest projecte.

Material	Consum (g)	Preu (€/g)	Cost (€)
PLA	24,64	0,003	0,07
PBT	7,65	0,0015	0,01
Cloroform	152,89	0,09	13,76
Acetona	6,32	0,06	0,38
HFIP	178,61	2,06	367,94
TFA	5,36	0,04	0,21
DMC	0,90	0,007	0,00
DMF	0,91	0,0009	0,00
Lipasa	2,88	1,32	3,80
TOTAL (€)			386,18

Taula 9. Costos corresponents a les despeses materials

Personal	Temps (h)	Preu (€/h)	Cost (€)
Estudiant pràctiques	600	8,00	4800,00
Tutor projecte	50	20,00	1000,00
Tècnic laboratori	2	15,00	30,00
TOTAL (€)			5830,00

Taula 10. Costos corresponents a les despeses personals

Equip	Preu (€)	Amortització (anys)	Ús (hores)	Cost (€)
Electrospinning	10000,00	8	50	7,13
Estufa-Agitador	500,00	2	150	4,28
Balança	600,00	10	30	0,21
Estufa de buit	5000,00	8	300	21,40
Microscopi electrònic	105,00 (€/h)	-	2	210,00
TOTAL				243,03

Taula 11. Costos corresponents a les despeses d'amortització

Tipus	Cost
Materials	386,18
Personal	5830,00
Amortitzacions	243,03
Impostos (21%)	1312,33
TOTAL	7771,53

Taula 12. Despeses totals del projecte

El cost final del projecte és de 7800 euros.

Bibliografia

- [1] JOHANNES REINHARD, C., 2012, *Products and applications of biopolymers*
- [2] DEL VALLE, L. J., CAMPS, R., DÍAZ, A., FRANCO, L., RODRÍGUEZ-GALÁN, A., PUIGGALÍ, J., 2011, *Electrospinning of polylactide and polycaprolactone mixtures for preparation of materials with tunable drug release properties*
- [3] DEL VALLE, L. J., ARADILLA, D., OLIVER, R., SPULCRE, F., GAMEZ, A., ARMELIN, E., ALEMÁN, C., ESTRANY, F., 2007, *Cellular adhesion and proliferation on poly(3,4-ethylenedioxythiophene): Benefits in the electroactivity of the conducting polymer*
- [4] MARTÍNEZ, P., MARÍN, P., *Diseño y estudio de una máquina de electrospinning*
- [5] LUCAS, S., *An investigation into how the volume of lipase affects the rate of the hydrolysis of lipids*
- [6] YÜCEL, S., TERZIOGLU, P., ÖZCİMEN, D., 2012, *Lipase applications in biodiesel production*
- [7] SILL, T., VON RECUM, H., 2008, *Electrospinning: applications in drug delivery and tissue*
- [8] MOHANTY, A. K., 2005, *Natural fibers, biopolymers and biocomposites*
- [9] MARTIN, O., AVÉROUS, L., 2001, *Poly(lactic acid): plasticization and properties of biodegradable multiphase systems*
- [10] BERNAL, F., 2003, *Avaluació econòmica de projectes d'experimentació en enginyeria química*

Annex A: Taules de mostres prèvies

Biopolímer	Dissolvent	Conc. desitjada (% pes)	Pes biopolímer (g)	Pes dissolvent (g)	Pes final (g)	Conc. final (% pes)
PLA	Cloroform	10,0	0,9795	9,1421	10,1216	9,68
PLA	Cloroform	10,0	0,9972	9,0632	10,0604	9,91
PLA	Cloroform	10,0	0,9978	9,3031	10,3009	9,69
PLA	Cloroform+acetona (2-1)	10,0	1,0119	9,8867	10,8986	9,28
PLA	Cloroform	5,0	0,5206	9,7602	10,2808	5,06
PLA	Cloroform+acetona (2-1)	10,0	1,0043	9,2048	10,2091	9,84
PLA	Cloroform	2,5	0,2453	10,0437	10,2890	2,38
PLA	Cloroform	1,0	0,1175	10,0659	10,1834	1,15
PLA	Cloroform	7,0	0,6877	9,1968	9,8845	6,96
PLA	Cloroform	5,0	0,5029	9,6991	10,2020	4,93
PLA	Cloroform	10,0	1,0030	9,1775	10,1805	9,85
PLA	Cloroform	10,0	1,0076	8,9558	9,9634	10,11
PLA	Cloroform	7,0	0,6937	9,2194	9,9131	7,00
PLA	Cloroform	7,0	0,7144	9,2856	10,0000	7,14
PLA	Cloroform	7,0	0,7120	9,2640	9,9760	7,14
PLA	Cloroform	10,0	1,0017	9,3290	10,3307	9,70
PLA	Cloroform	12,0	1,2102	8,7917	10,0019	12,10
PLA	HIFP	9,0	0,9006	9,3584	10,2590	8,78
PLA	HIFP	9,0	0,8945	8,9906	9,8851	9,05
PLA	HIFP	12,0	1,2340	9,2090	10,4430	11,82

Taula 13. Mostres de PLA realitzades abans de trobar les condicions òptimes

Biopolímer	Dissolvent	Conc. desitjada (% pes)	Pes biopolímer (g)	Pes dissolvent (g)	Pes final (g)	Conc. final (% pes)
PBT	HIFP	9,0	1,2828	12,8847	14,1675	9,05
PBT	HIFP	9,0	0,8985	9,5915	10,4900	8,57

Taula 14. Mostres de PBT realitzades abans de trobar les condicions òptimes

Biopolímer	Dissolvent 1	Conc. enzim desitjada	Pes biopolímer (g)	Pes dissolvent 1 (g)	Pes enzim (g)	Pes final (g)	Conc. biopolímer (% pes)	Conc. enzim (% pes)	Inc. enzim	Pes dissolvent (g)
PLA	HIFP	10	0,9200	8,9843	0,0957	10,00	9,2	10,4	Directa	0,00
PLA	HIFP	10	0,9310	8,0794	0,0896	10,00	9,3	9,6	Dissolt (DMC)	0,90
PLA	HIFP	10	0,9040	9,0070	0,0890	10,00	9,0	9,8	Directe	0,00
PLA	HIFP	10	0,9240	8,9810	0,0950	10,00	9,2	10,3	Directe	0,00
PLA	HIFP	10	0,9280	8,9766	0,0954	10,00	9,3	10,3	Directe	0,00
PLA	HIFP	10	0,8946	8,1534	0,0910	10,36	8,6	10,2	Dissolt (TFA)	1,22
PLA	HIFP	10	0,8870	8,4790	0,0890	10,05	8,8	10,0	Dissolt (TFA)	0,59
PLA	HIFP	10	0,9000	8,2100	0,0890	10,00	9,0	9,9	Dissolt (TFA)	0,80
PLA	HIFP	10	0,9177	8,0843	0,0932	9,91	9,3	10,2	Dissolt (TFA)	0,81

Taula 15. Mostres de PLA amb enzim realitzades abans de trobar les condicions òptimes

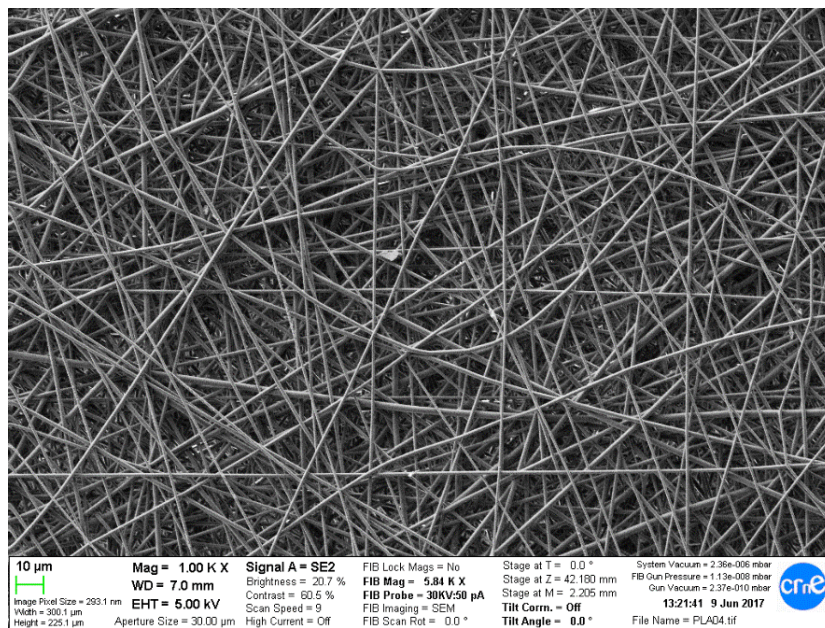
Biopolímer	Dissolvent 1	Conc. enzim desitjada	Pes biopolímer (g)	Pes dissolvent 1 (g)	Pes enzim (g)	Pes final (g)	Conc. biopolímer (% pes)	Conc. enzim (% pes)	Inc. enzim	Pes dissolvent (g)
PBT	HIFP	10	0,9060	9,0044	0,0896	10,00	9,1	9,9	Directa	0,00
PBT	HIFP	10	0,9230	8,9830	0,0940	10,00	9,2	10,2	Directa	0,00
PBT	HIFP	10	0,9090	8,9973	0,0937	10,00	9,1	10,3	Directa	0,00
PBT	HIFP	10	0,9274	8,4046	0,0900	10,43	8,9	9,7	Dissolt (TFA)	1,01
PBT	HIFP	10	0,9020	8,1250	0,0890	10,03	9,0	9,9	Dissolt (DMF)	0,91
PBT	HIFP	10	0,8953	8,1107	0,0920	10,03	8,9	10,3	Dissolt (TFA)	0,93

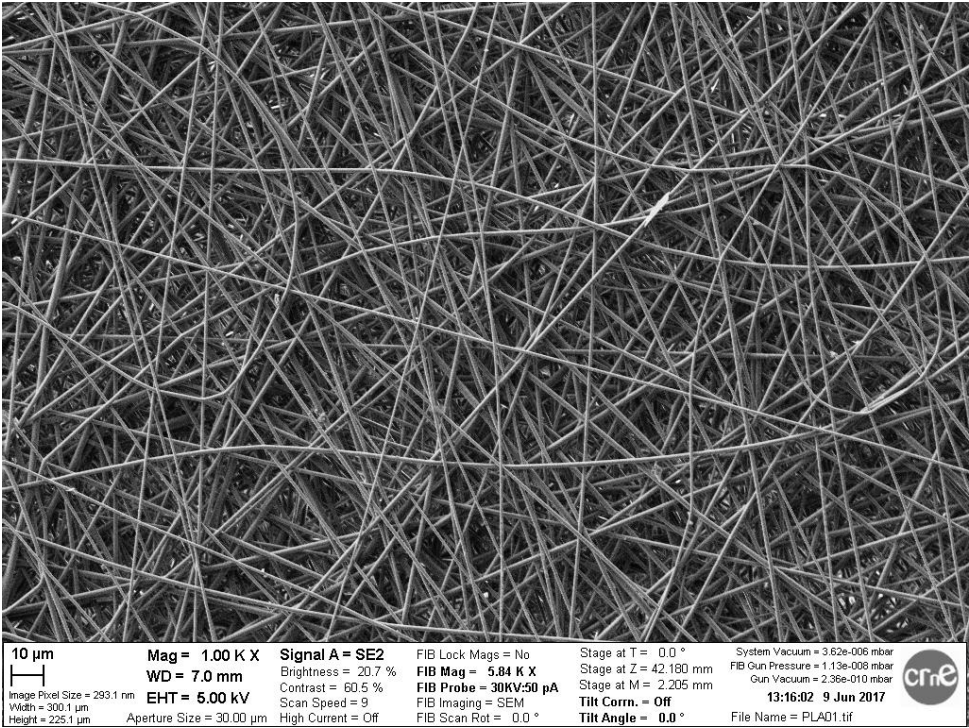
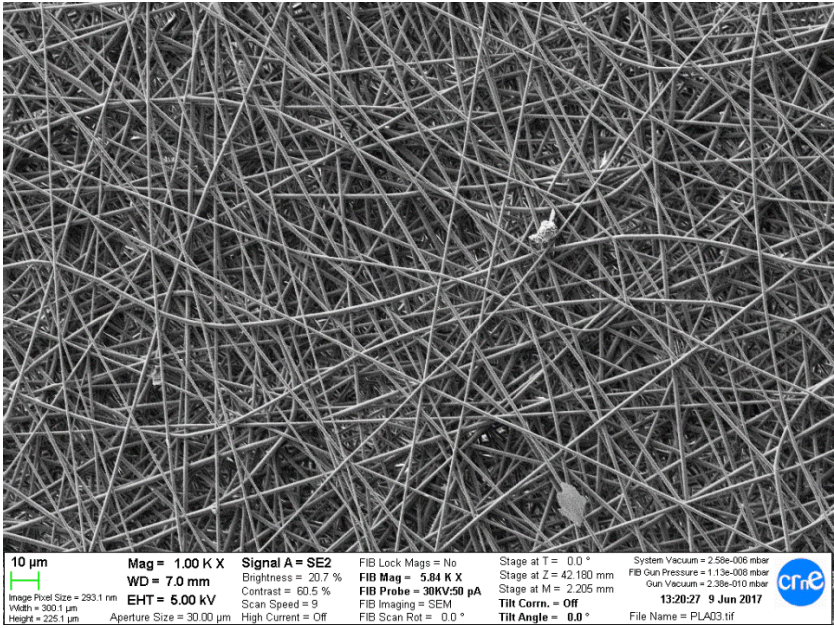
Taula 16. Mostres de PBT amb enzim realitzades abans de trobar les condicions òptimes

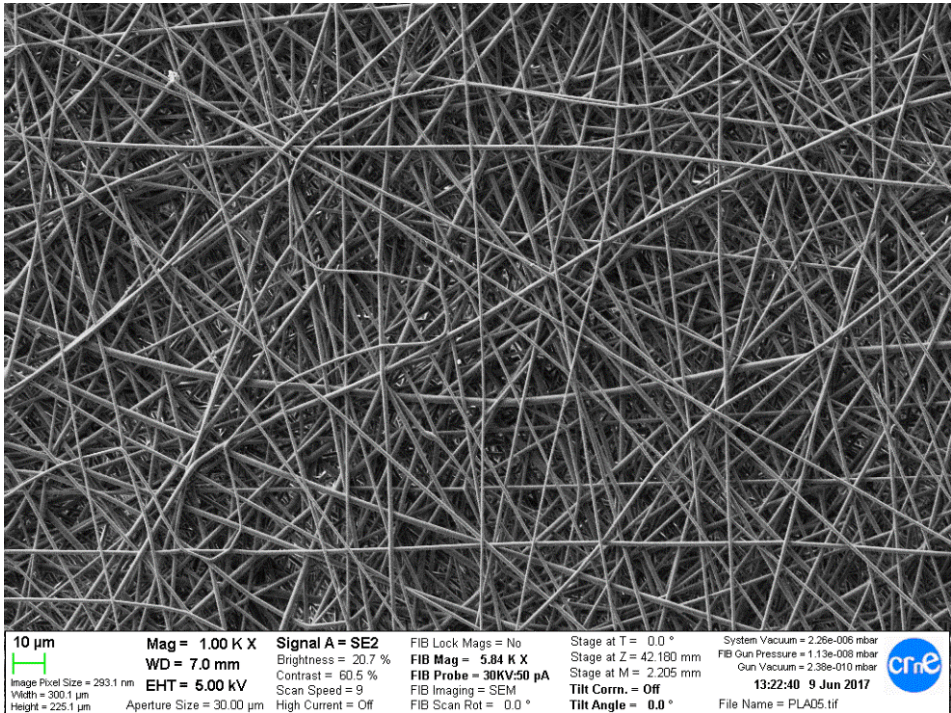
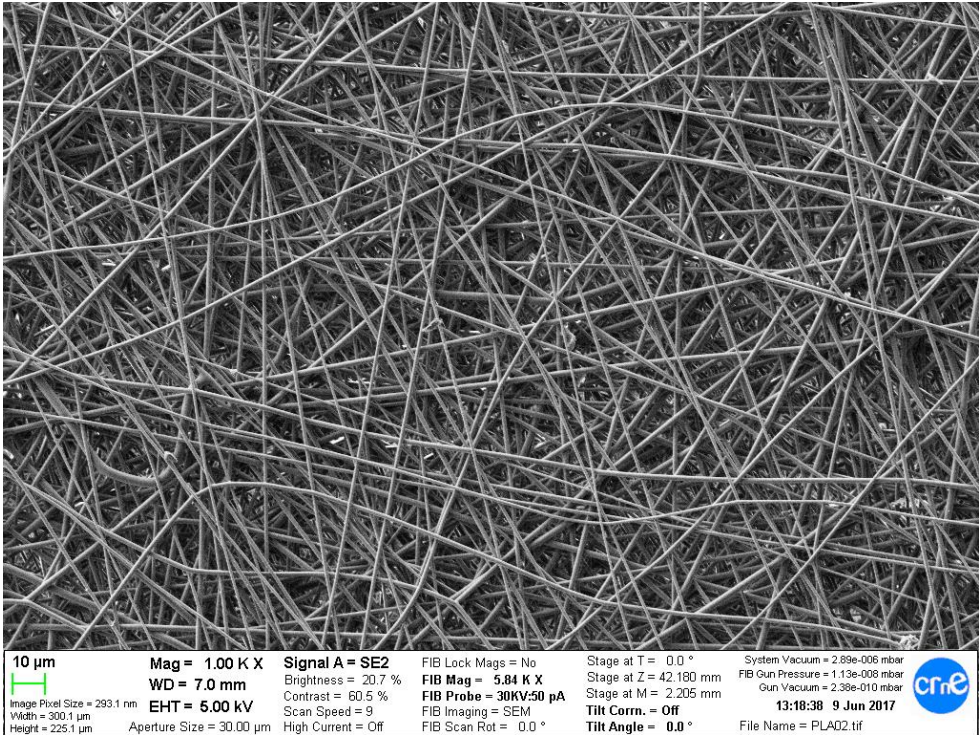
Annex B: Imatges complementàries

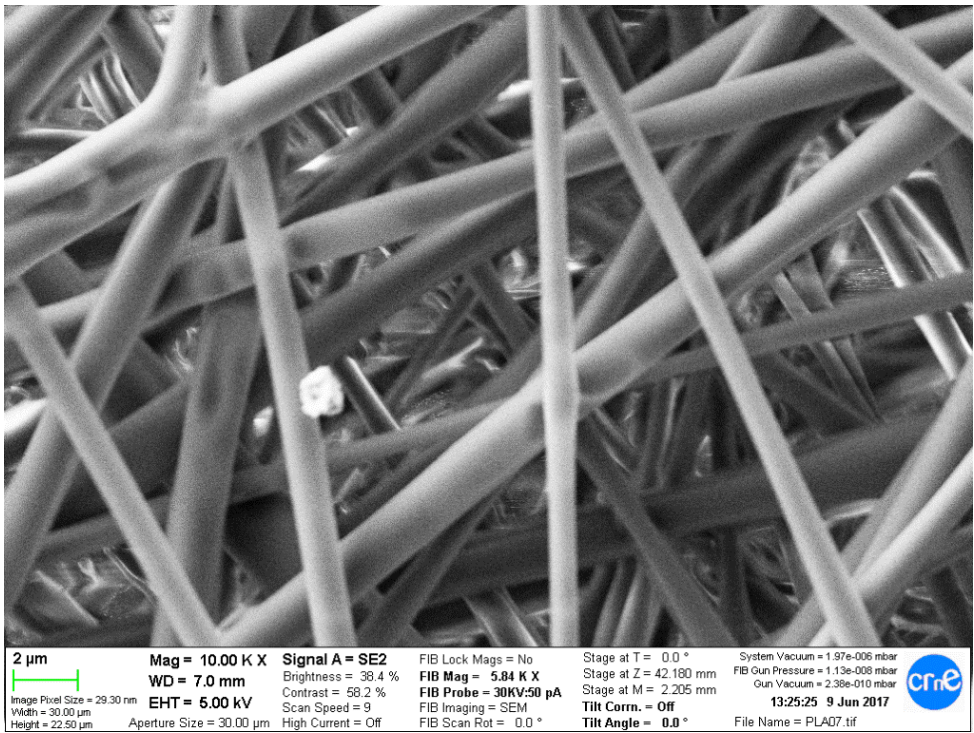
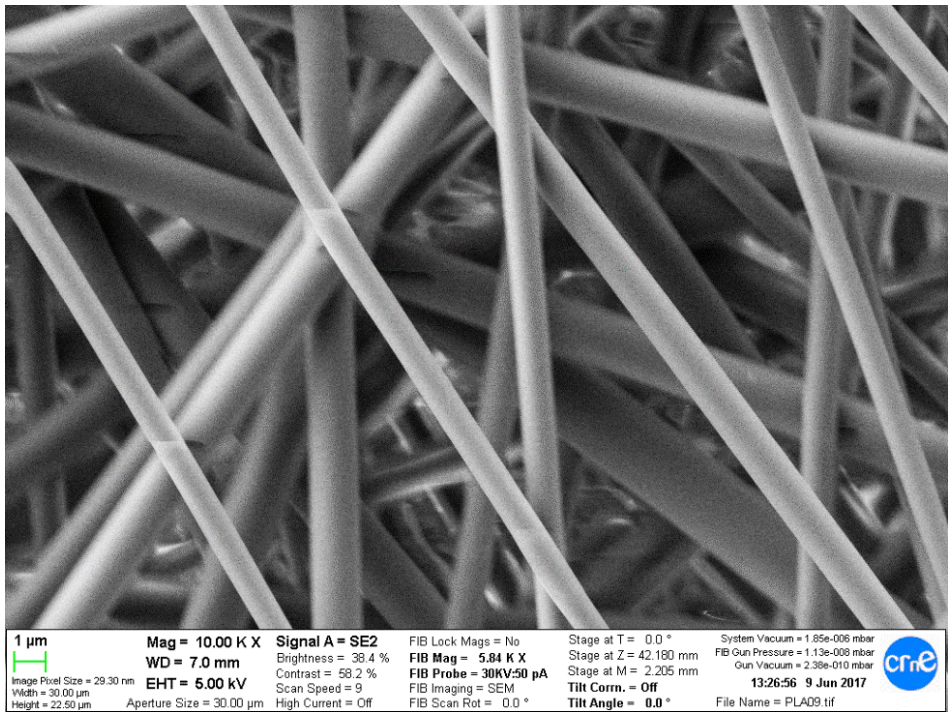
En aquest annex es recullen les imatges obtingudes durant la sessió del microscopi electrònic. De cadascuna de les 4 matrius (PLA, PBT, PLA + enzim, PBT + enzim), s'han pres 5 captures a 1000 augments, 5 captures a 10000 augments i 1 captura a 300 augments. Totes aquestes imatges estan preses de mostres de les matrius finals que s'han emprat en cada cas per l'experiment.

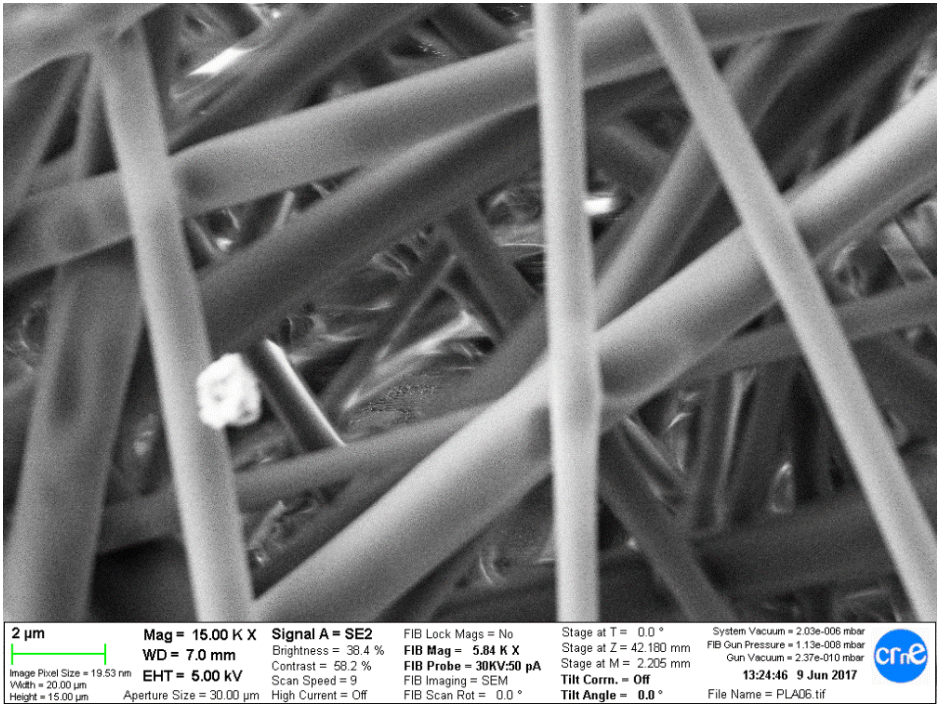
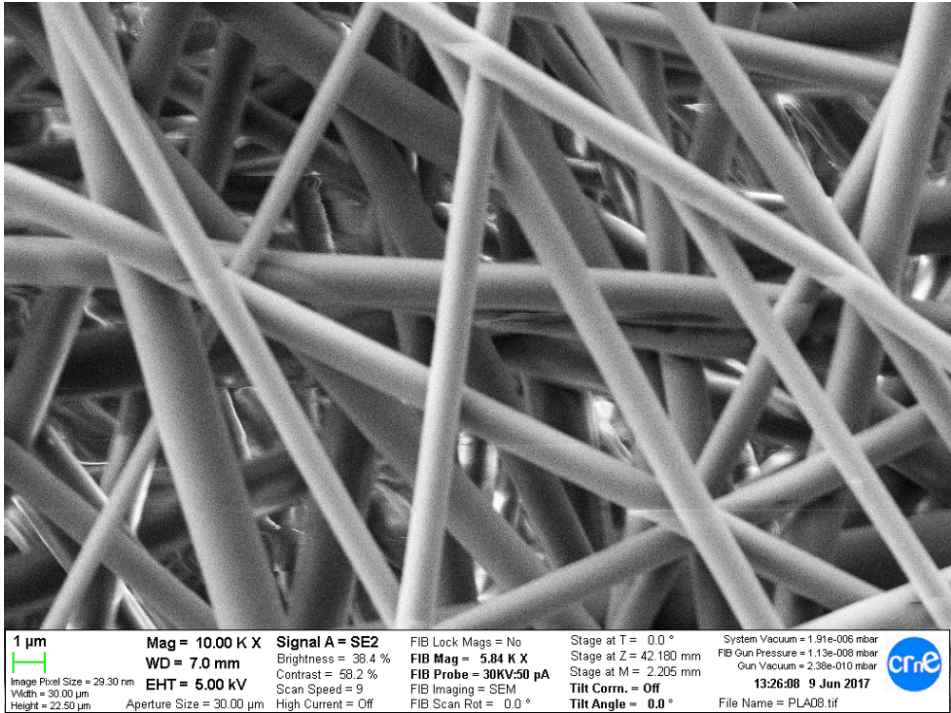
- PLA

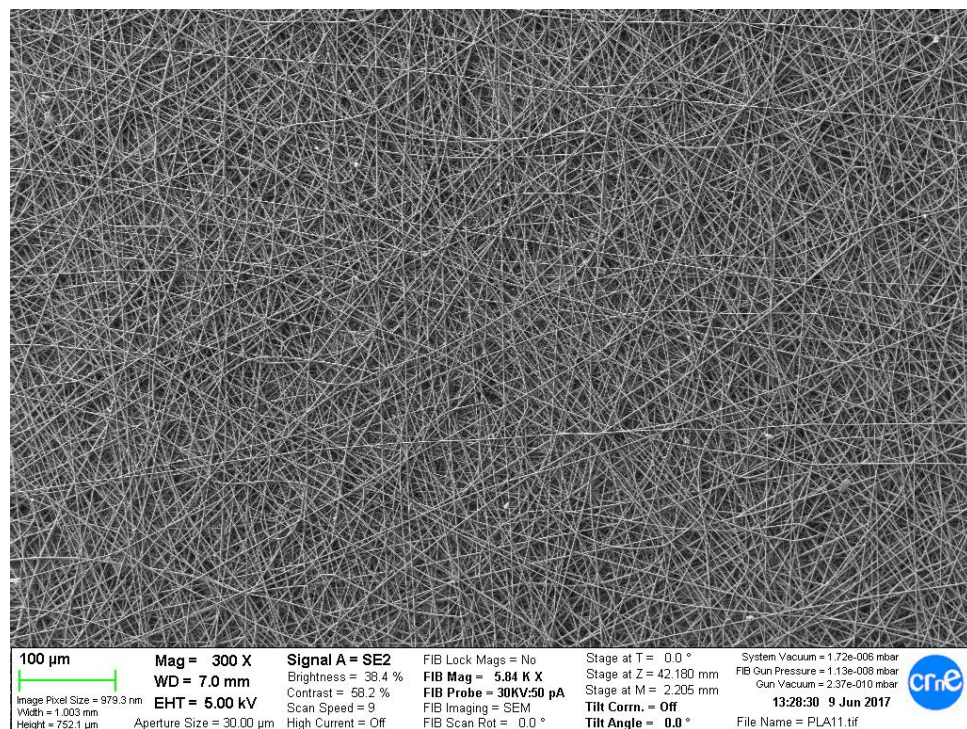
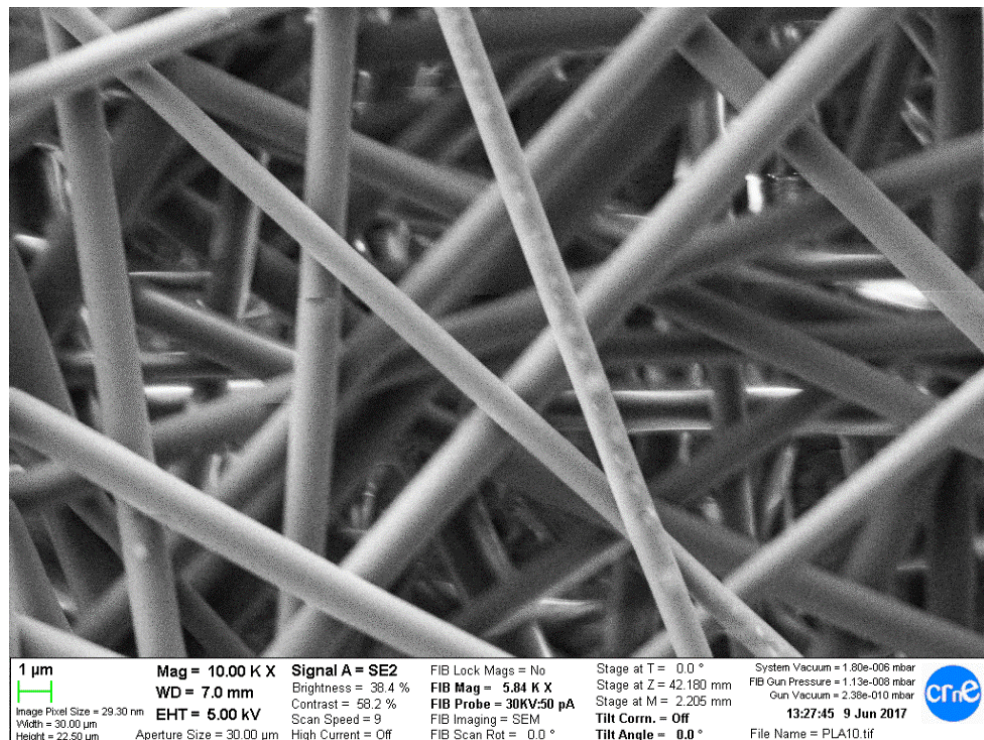




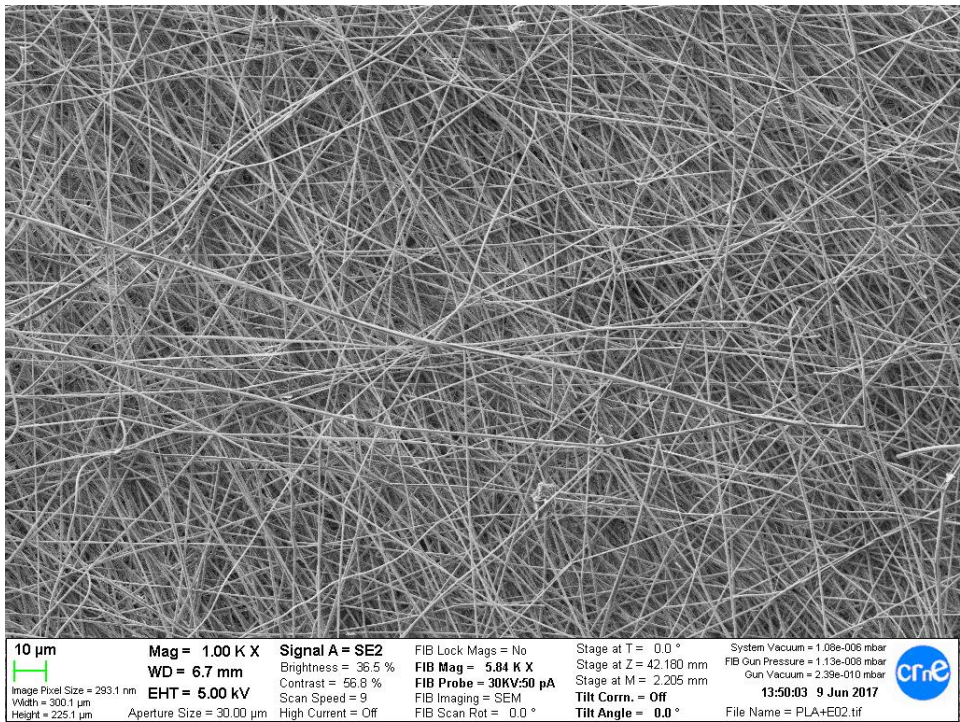
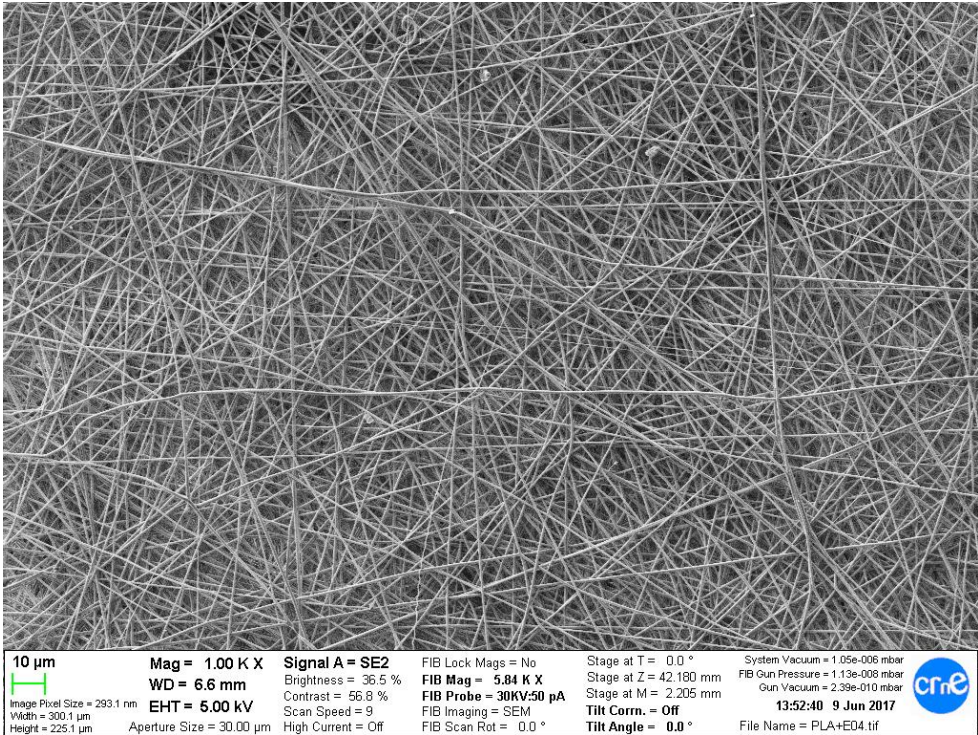


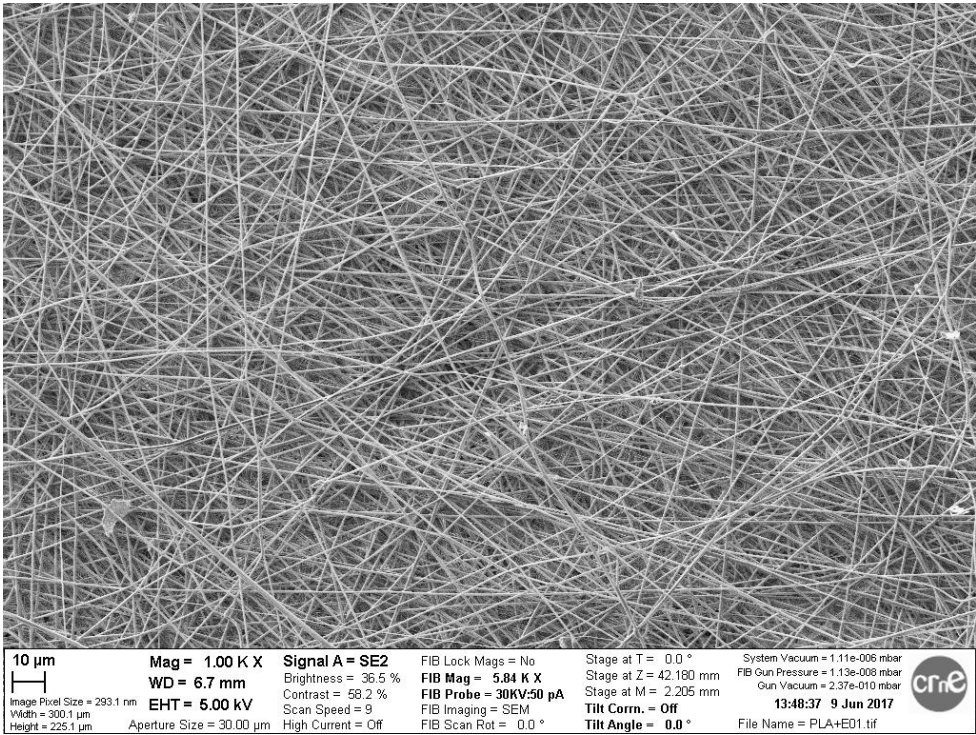
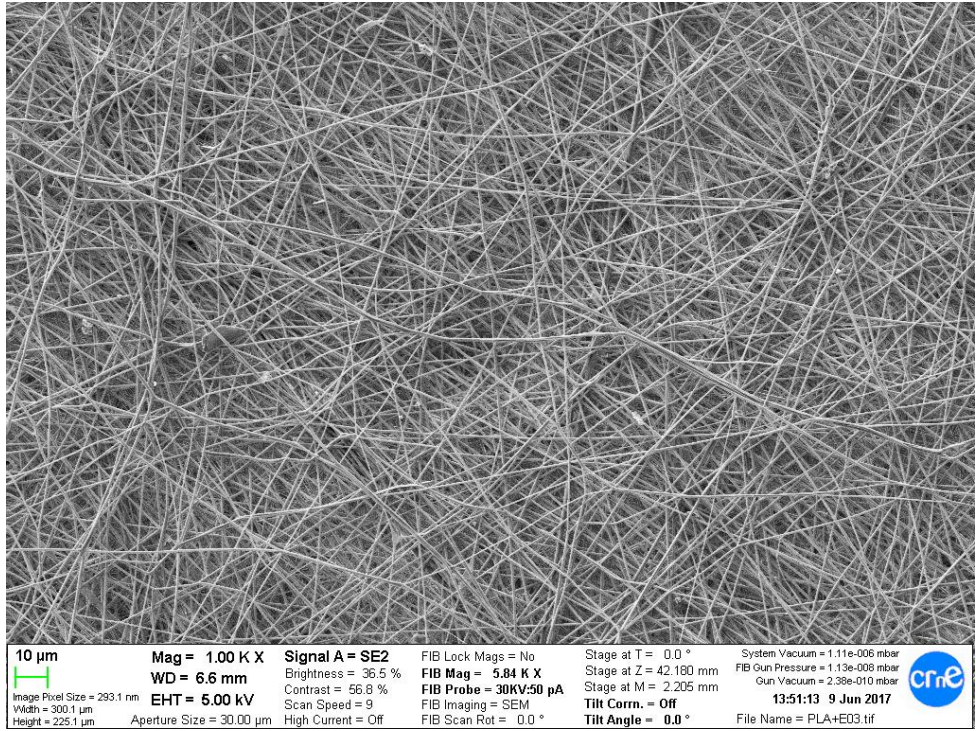


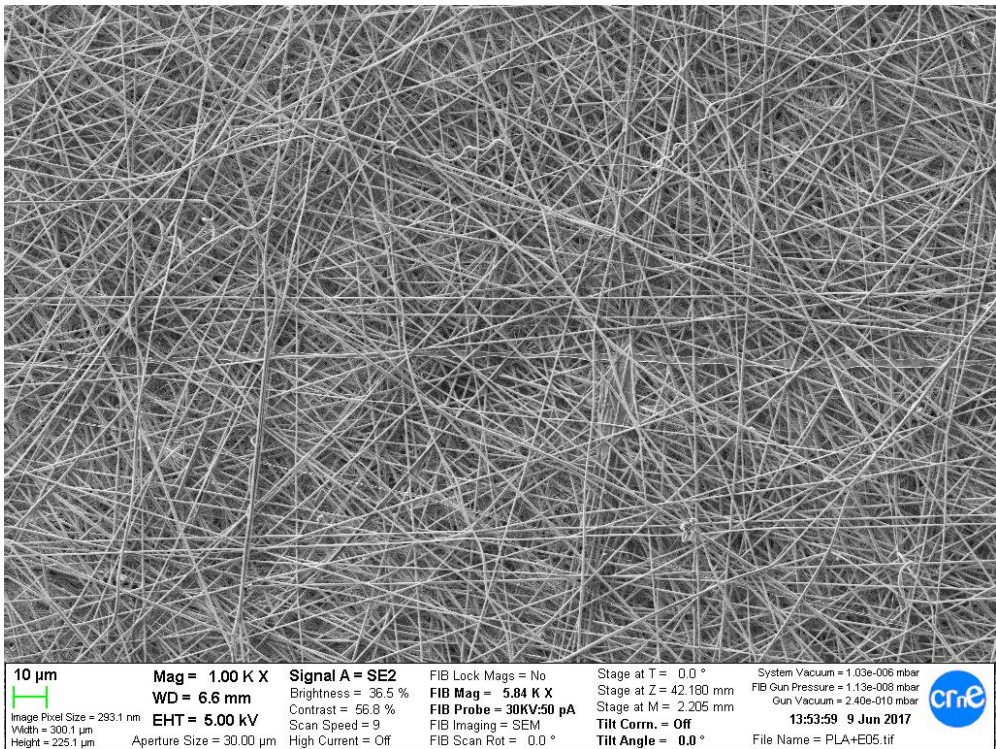


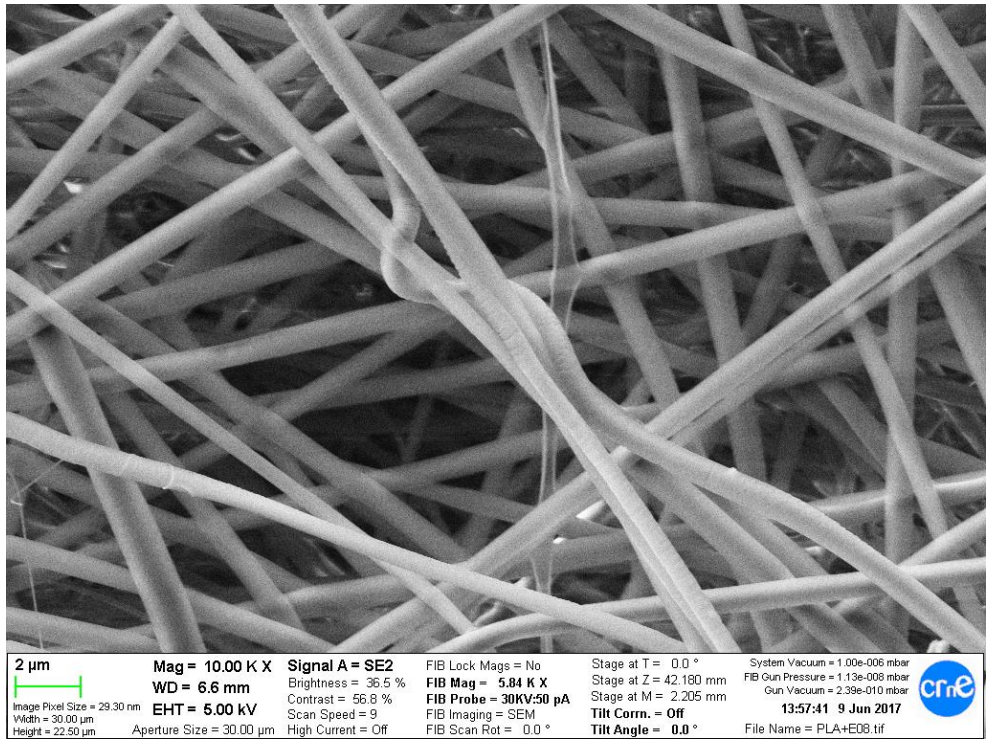
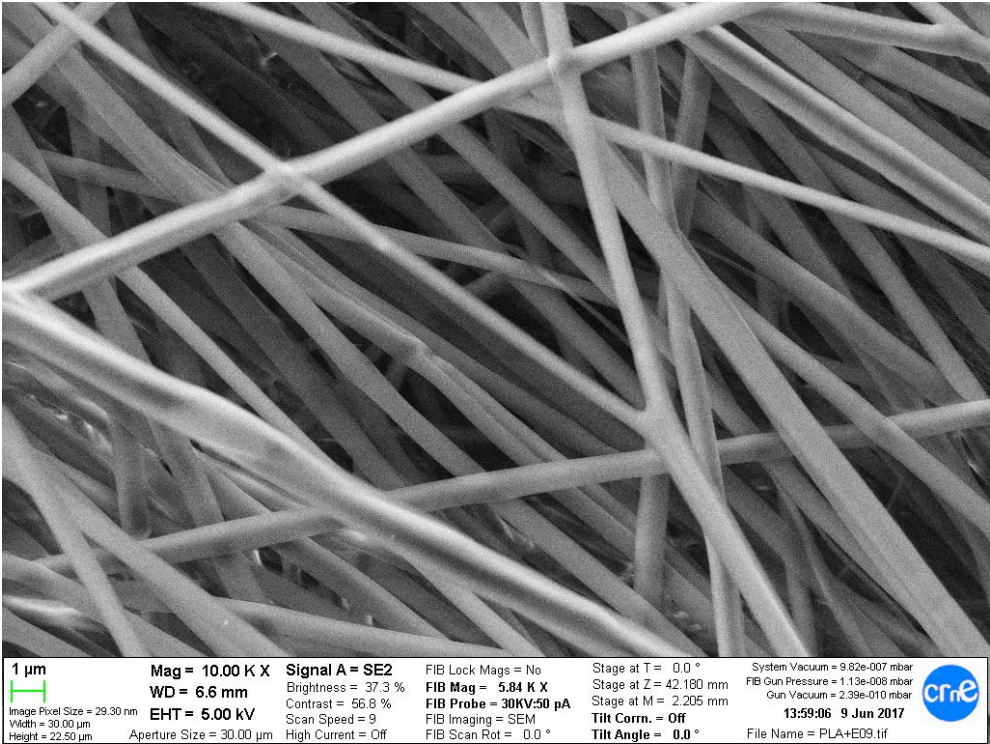


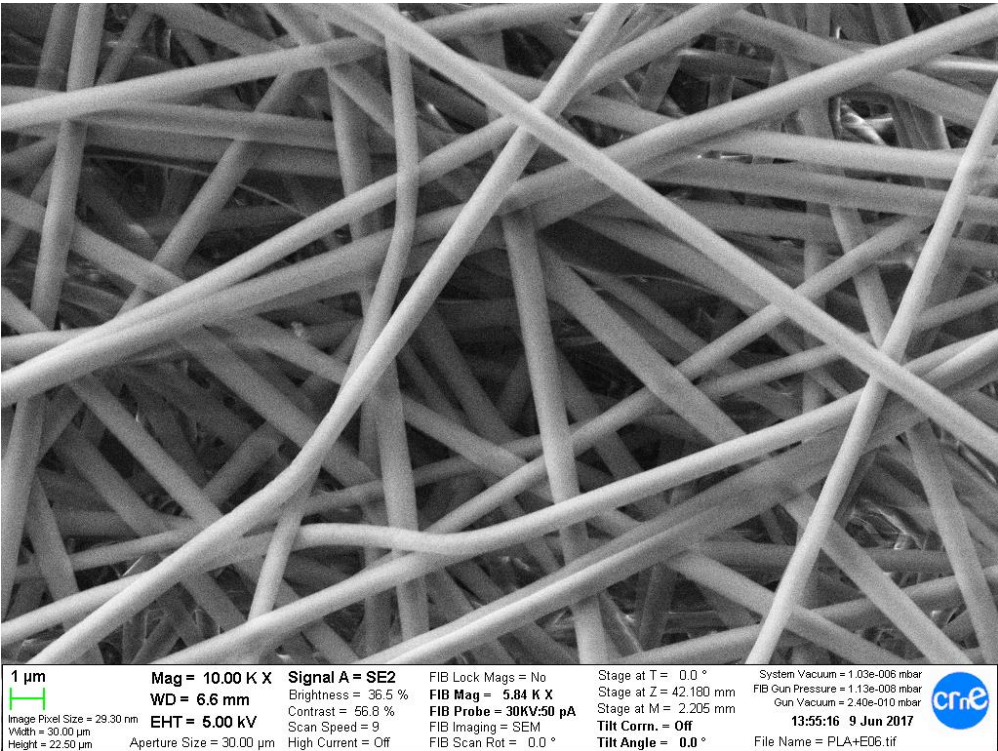
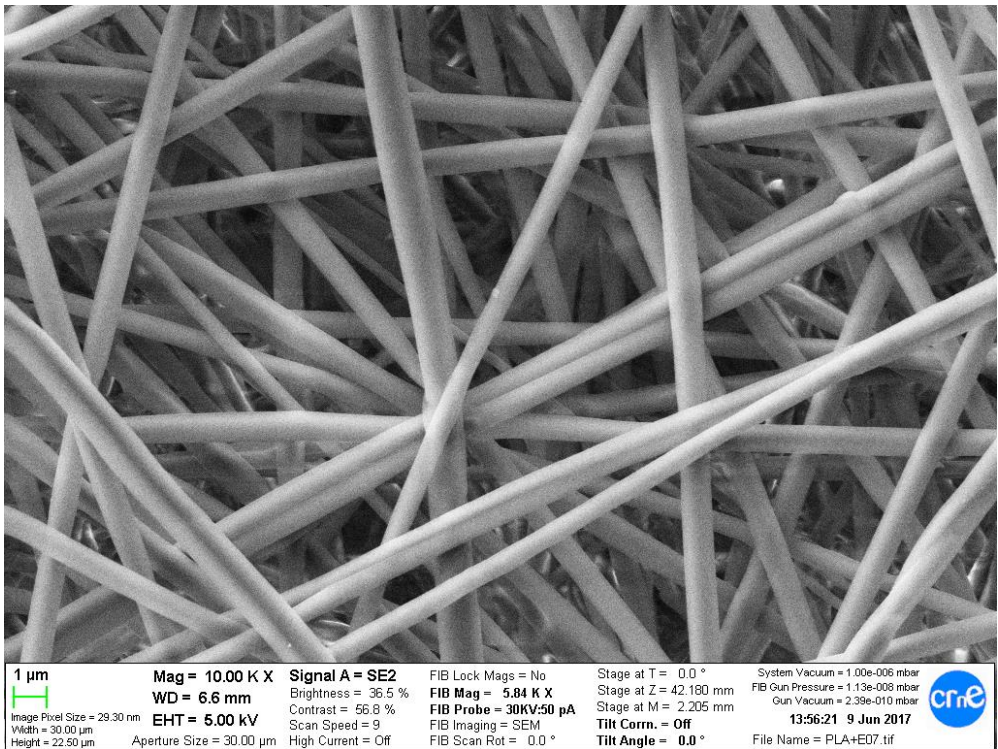
- **PLA + enzim**

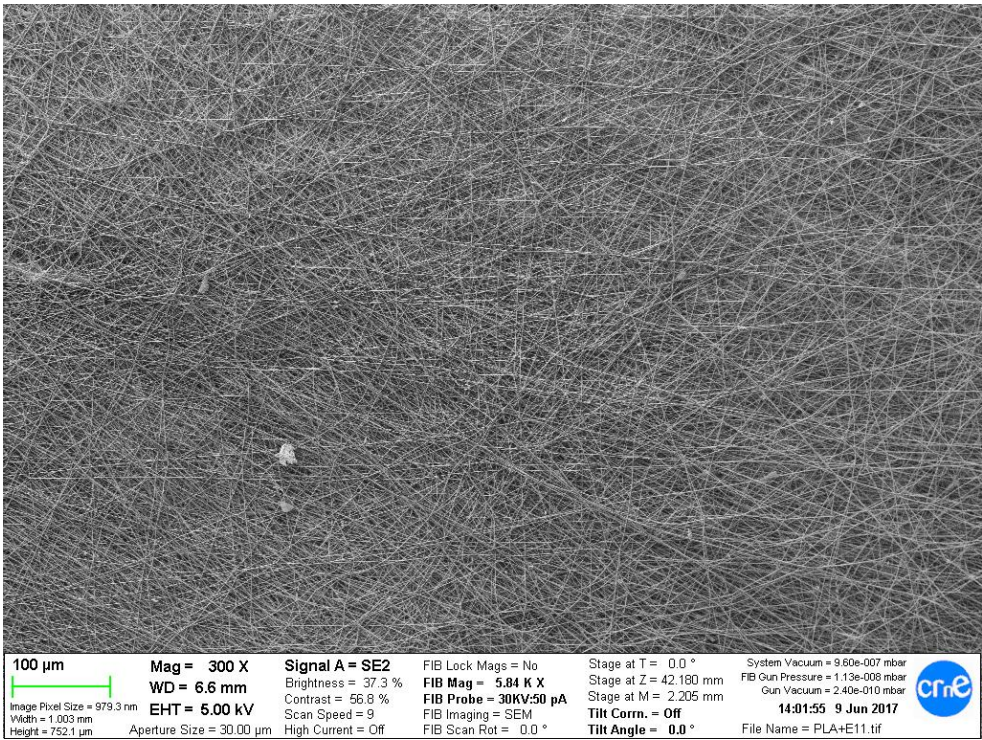
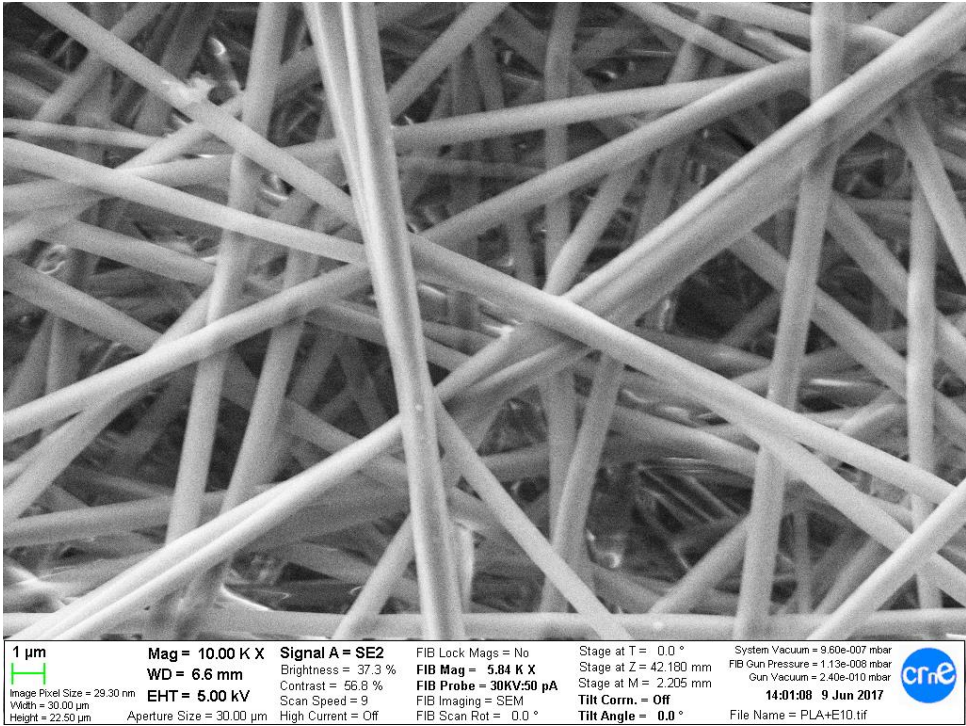




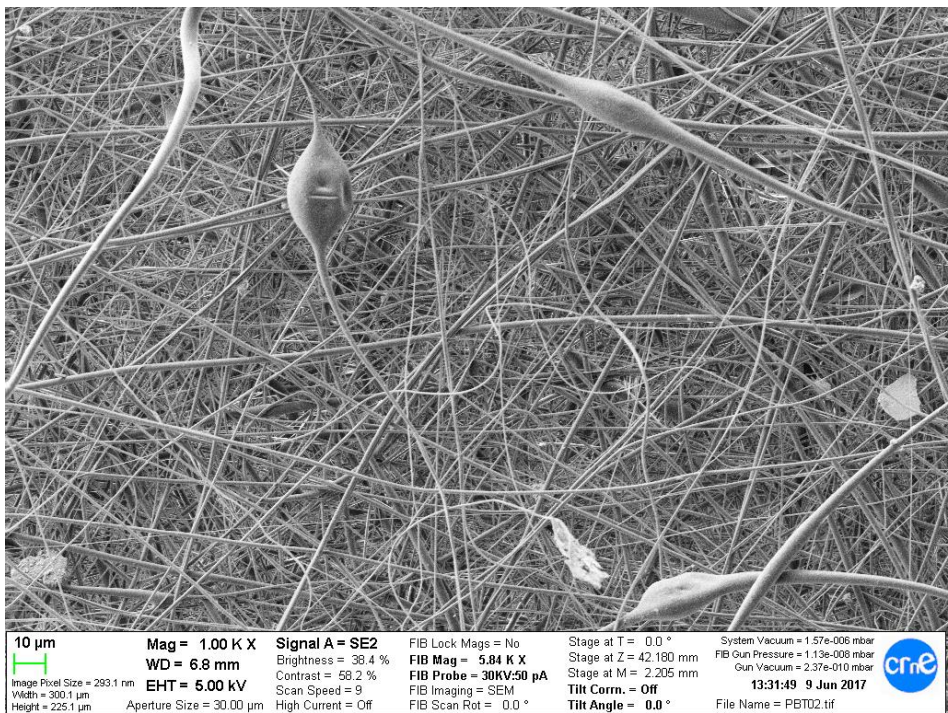
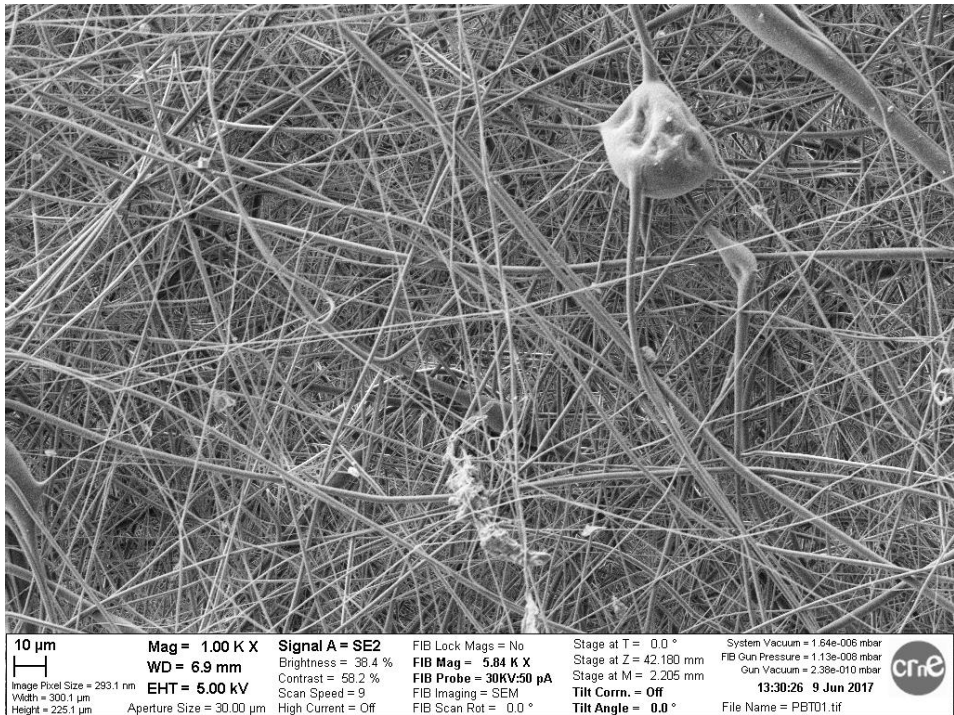


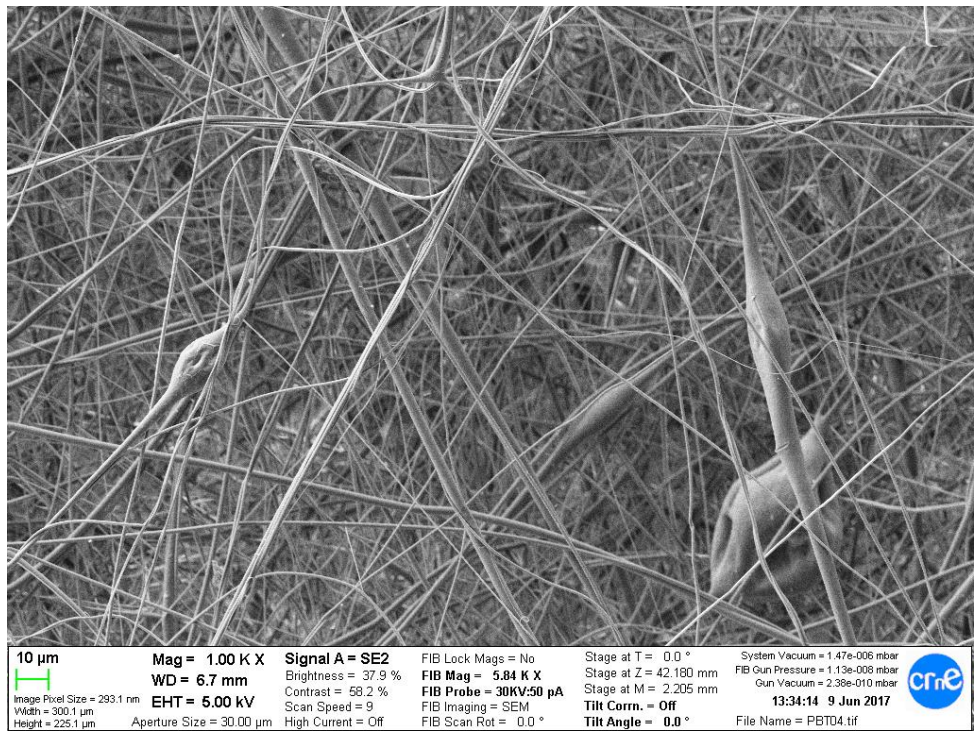
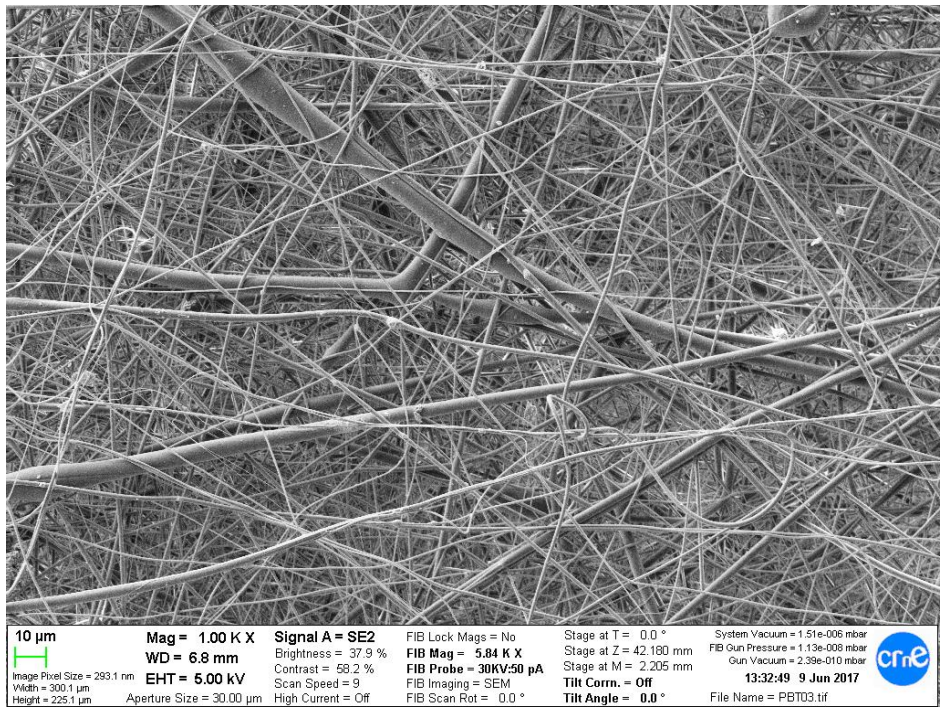


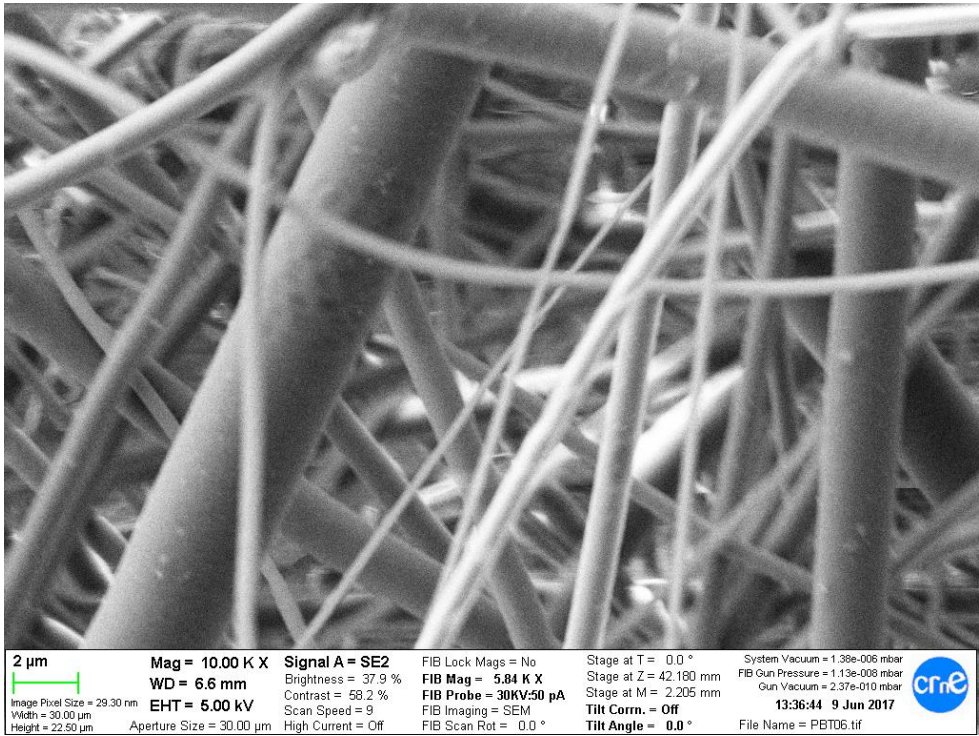
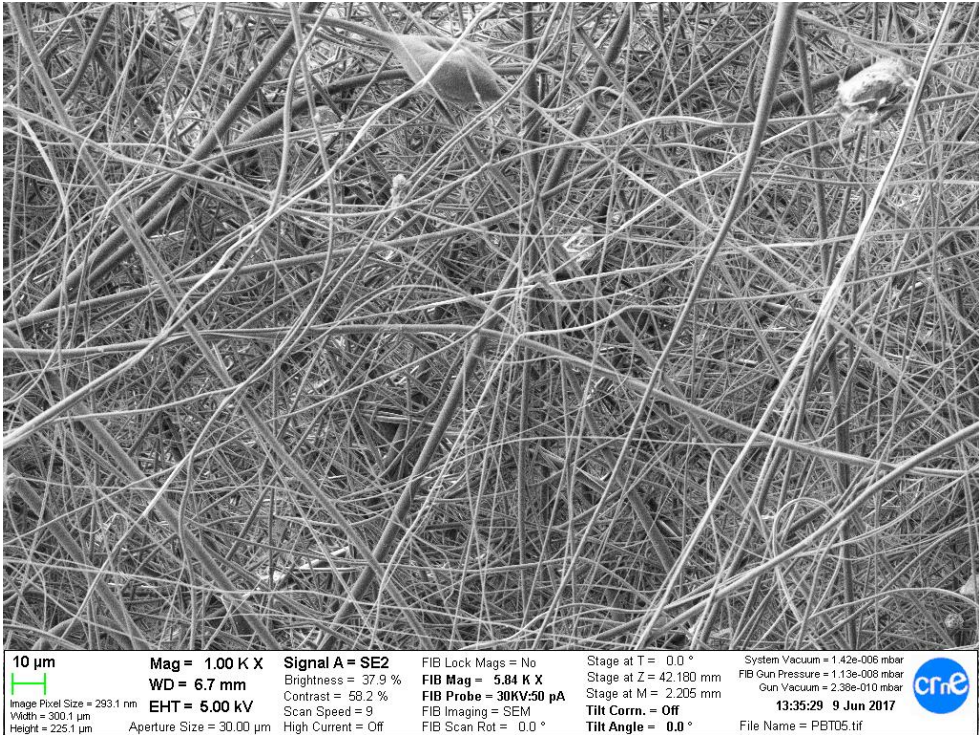


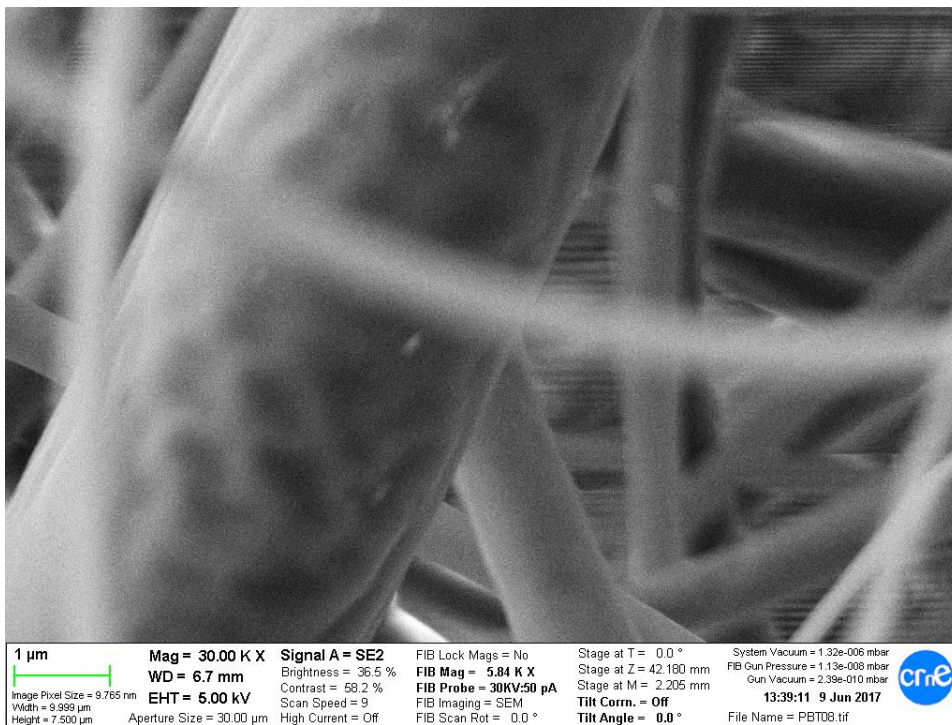
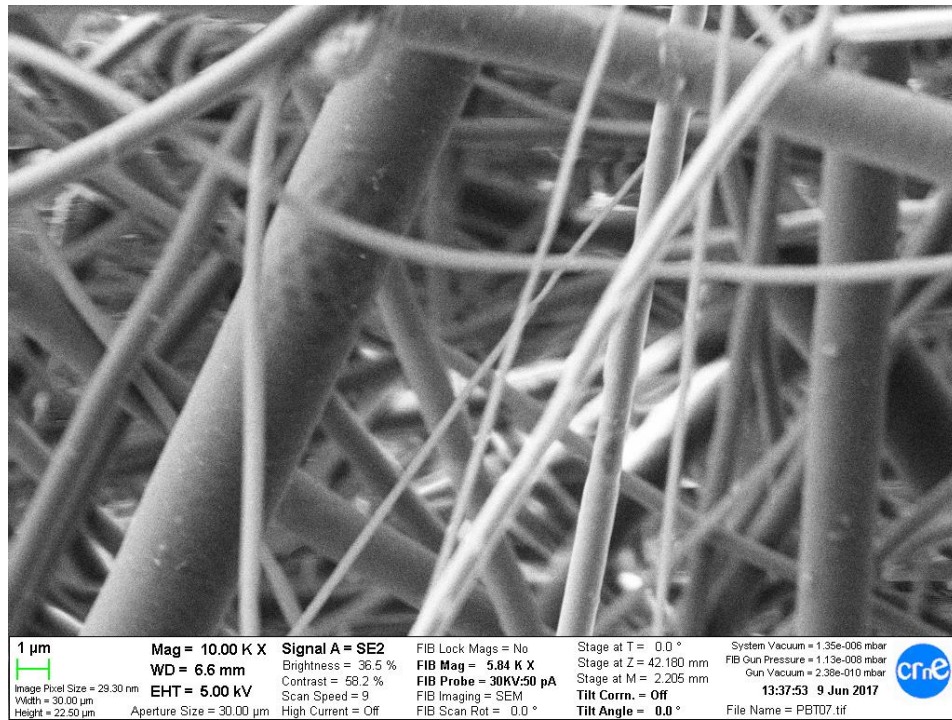


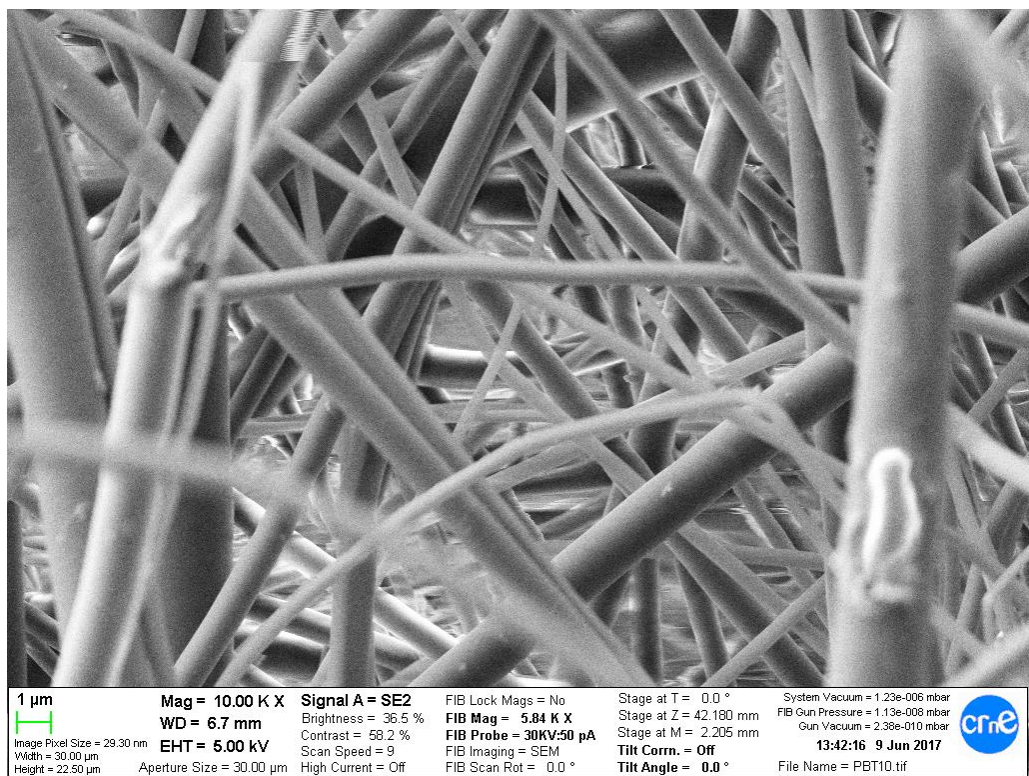
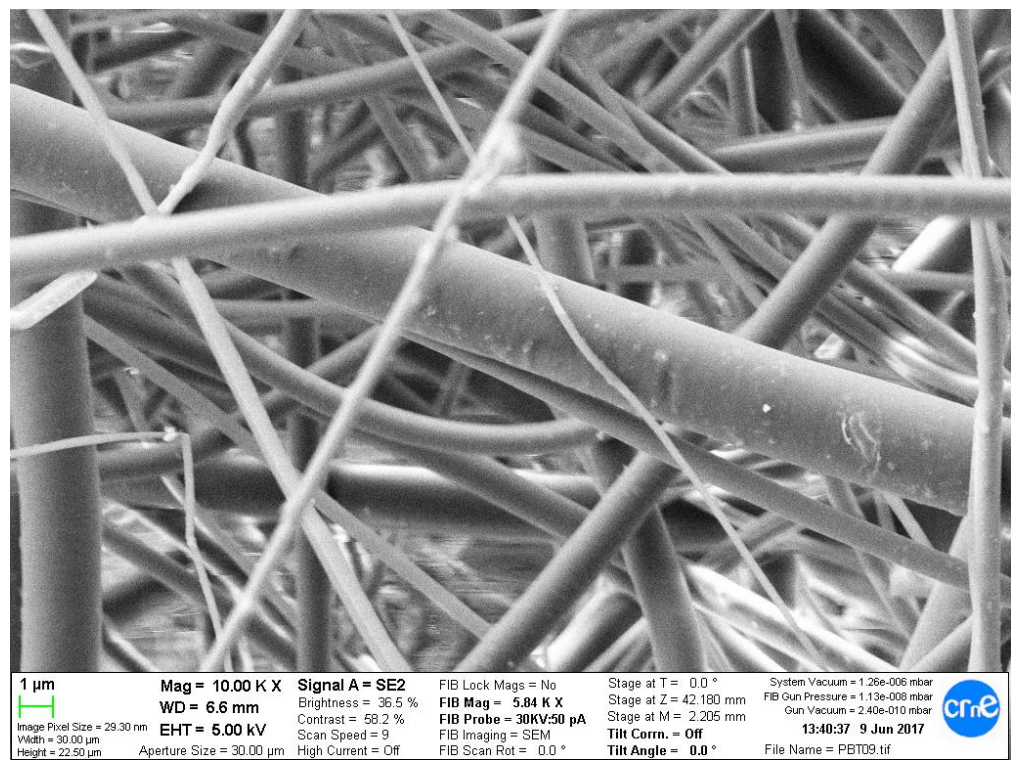
• PBT

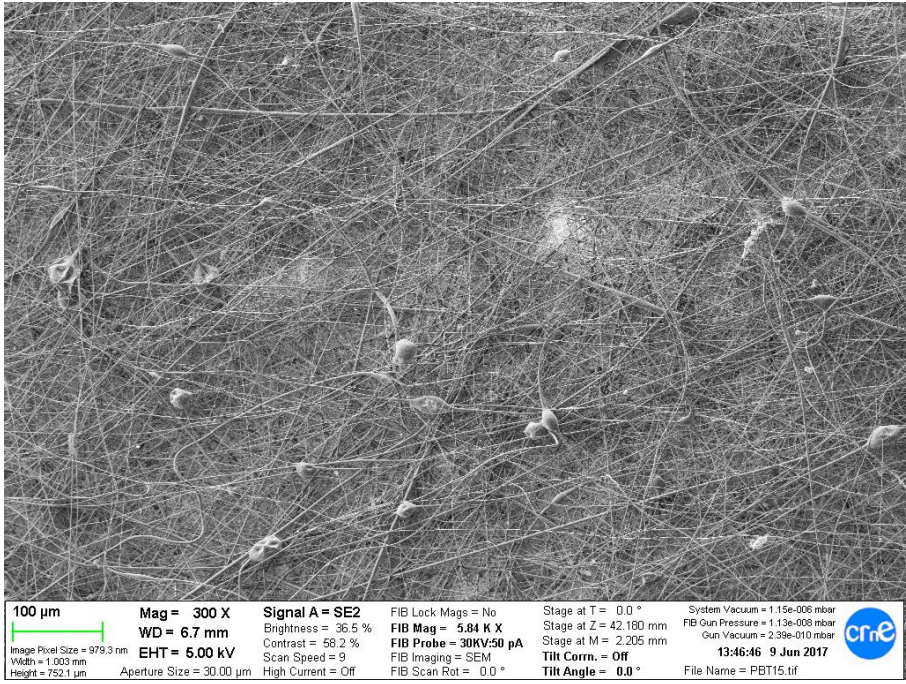




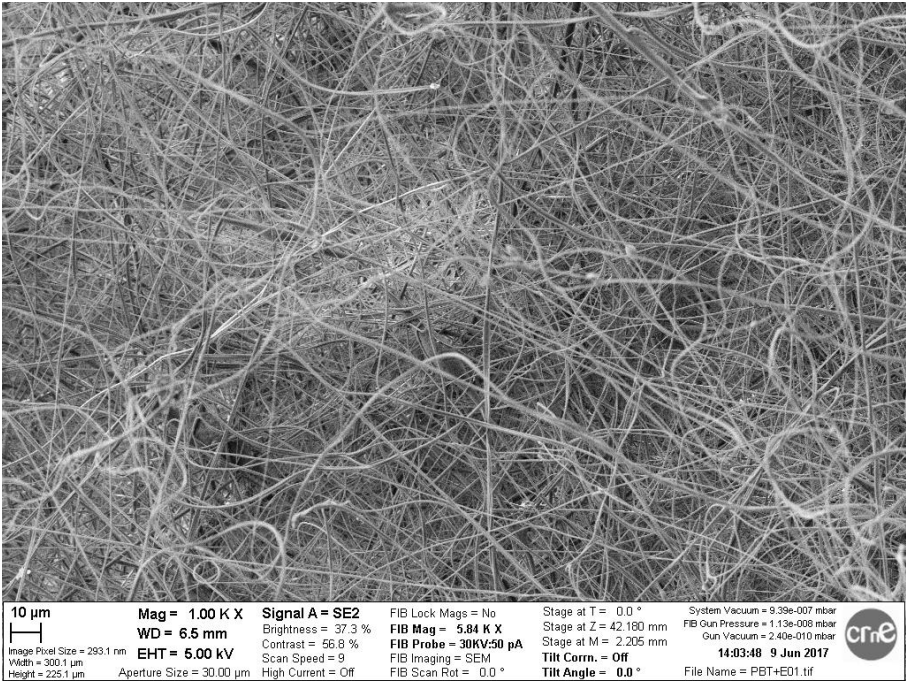


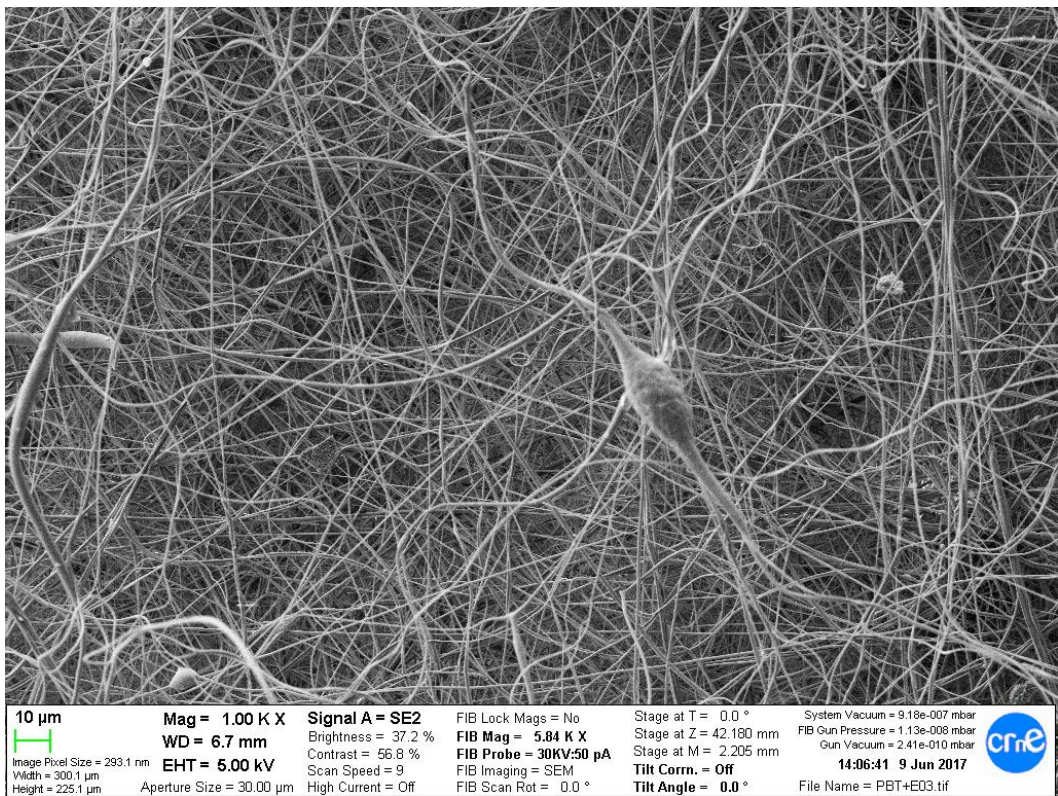
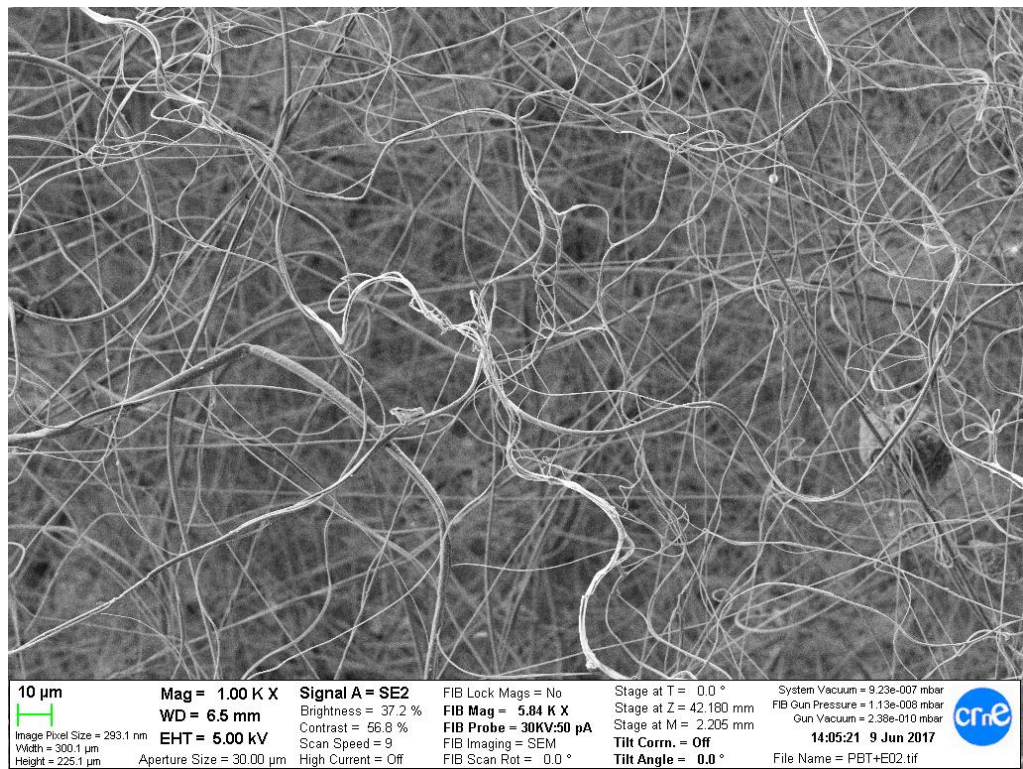


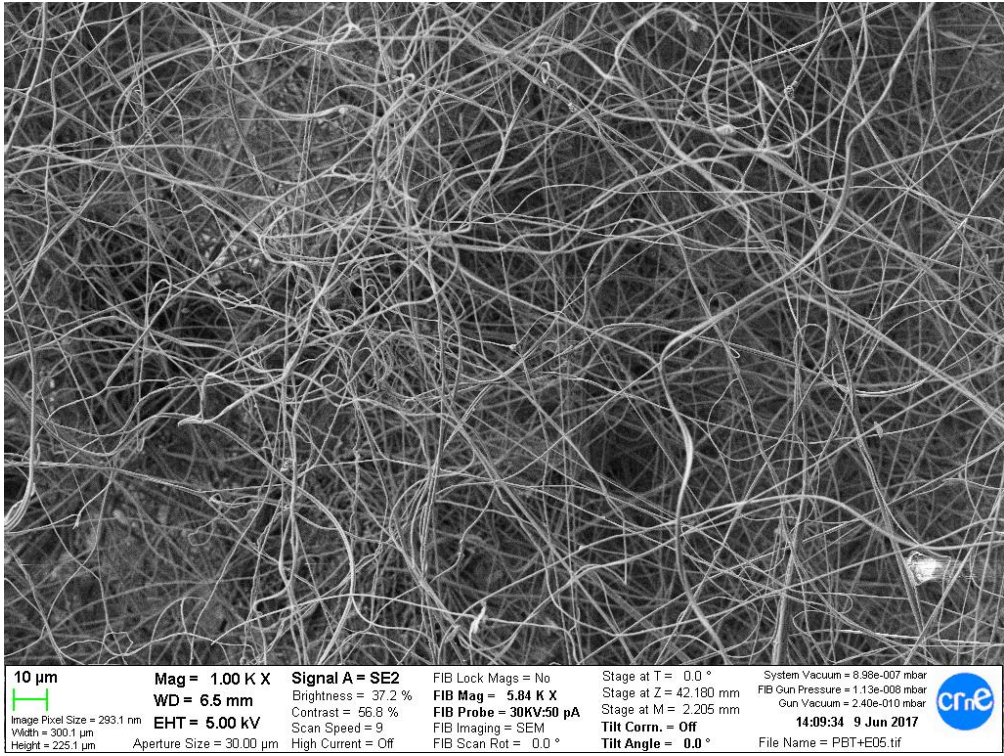
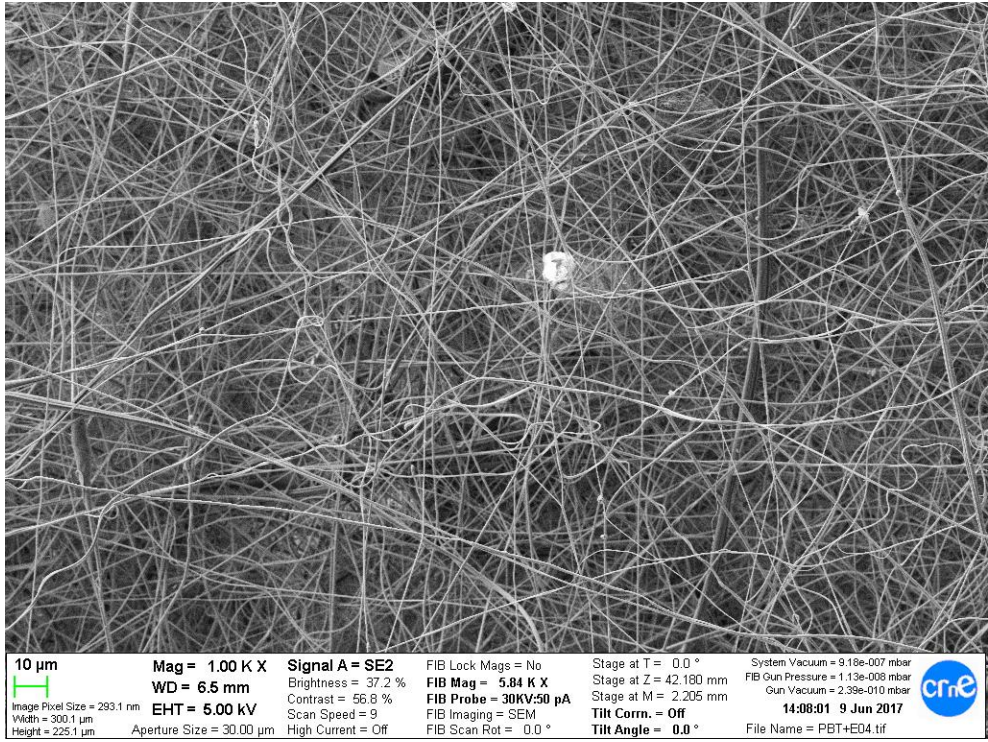


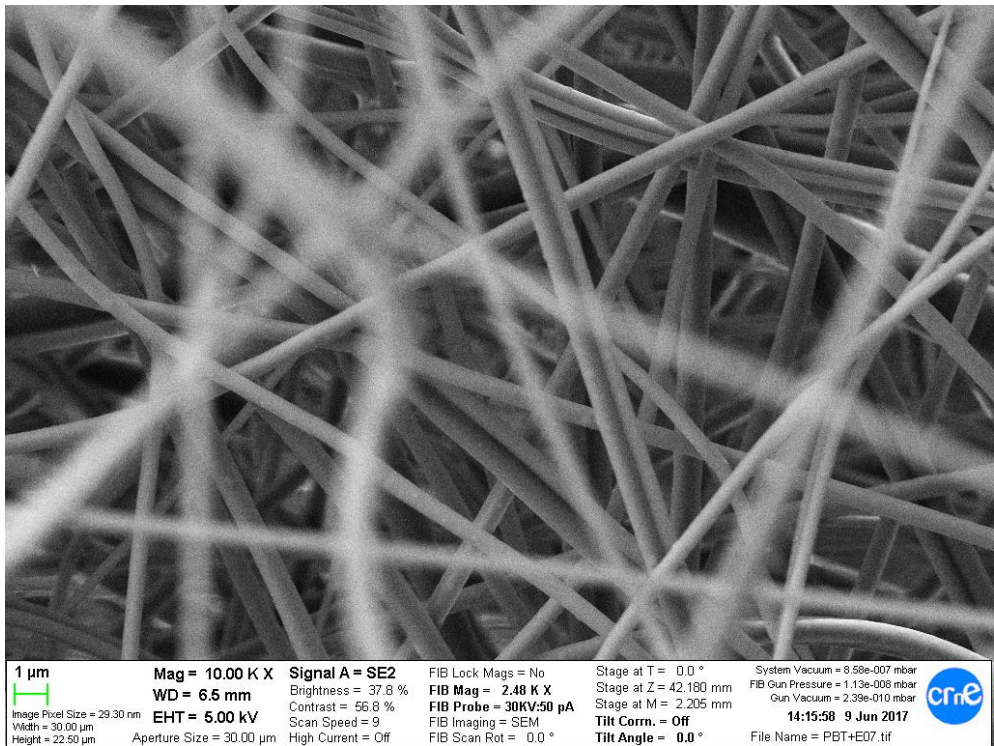
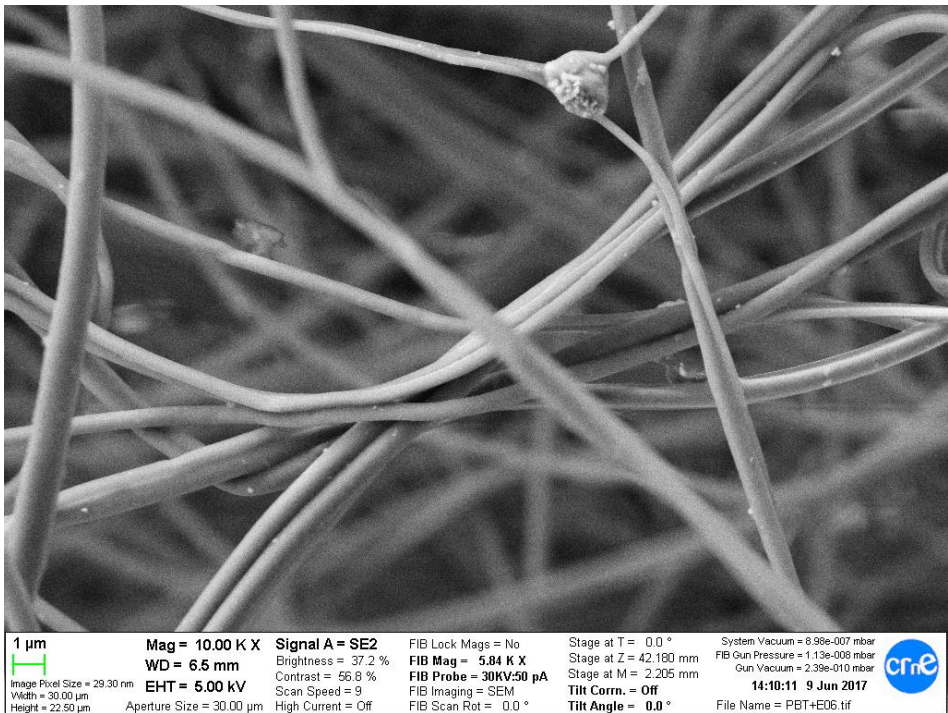


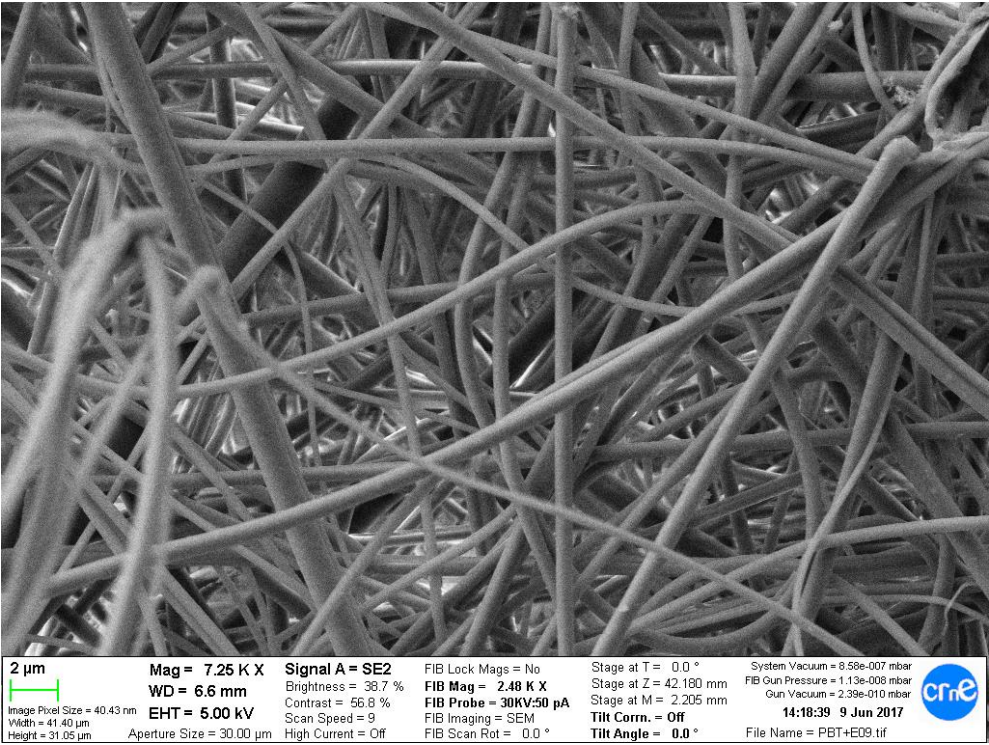
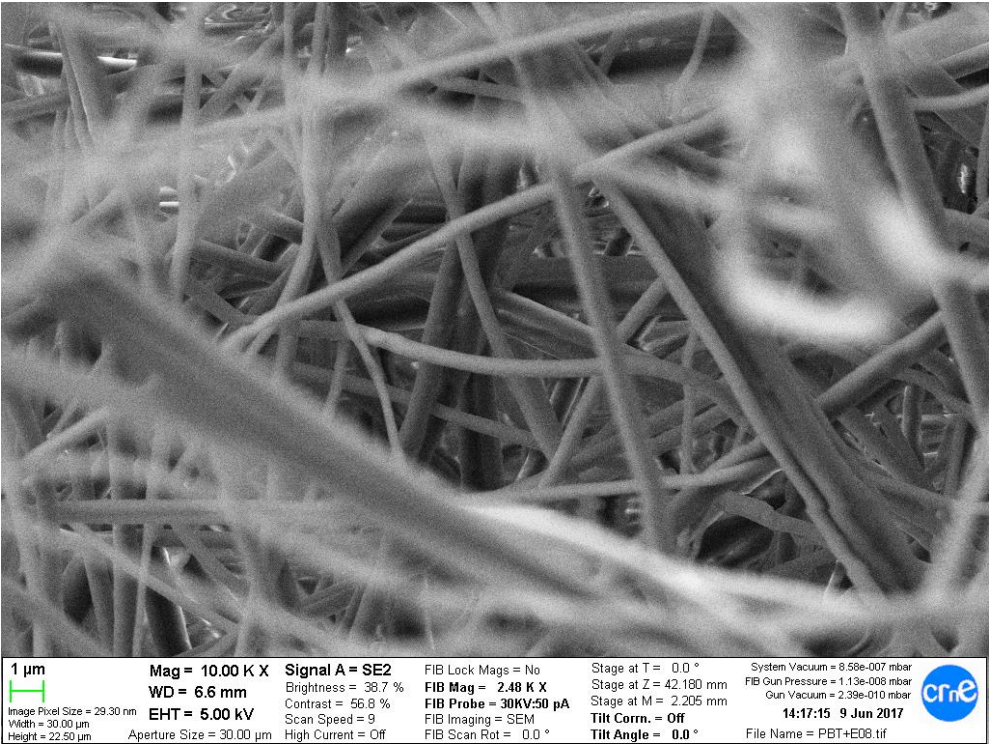
- PBT + enzim

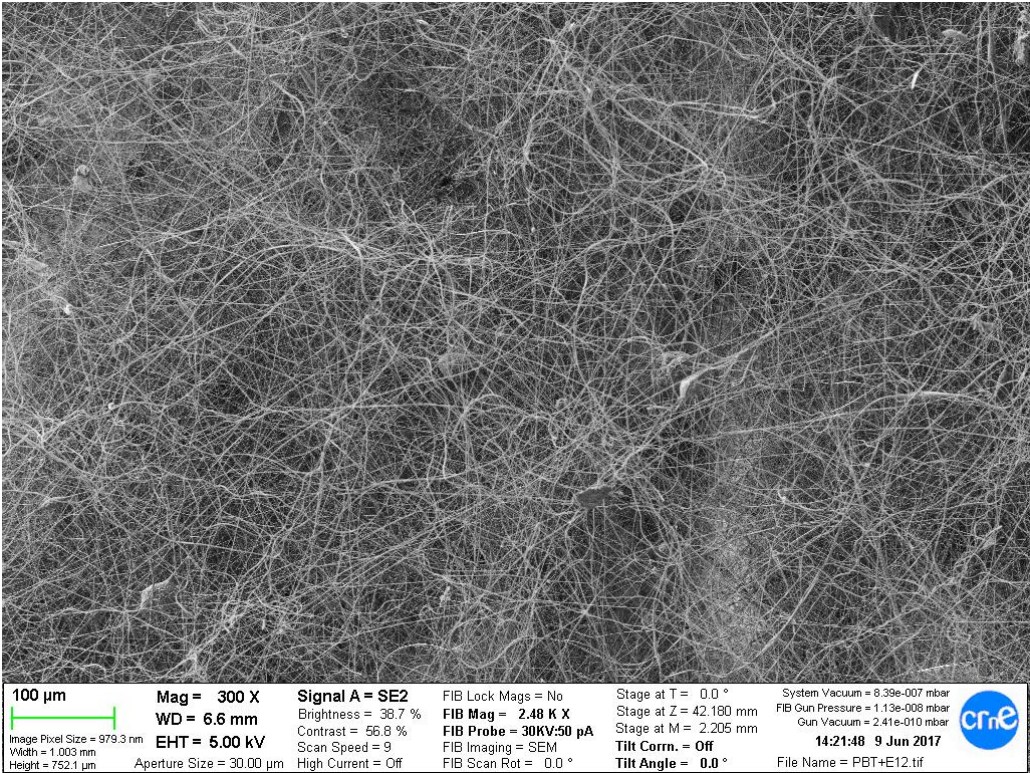
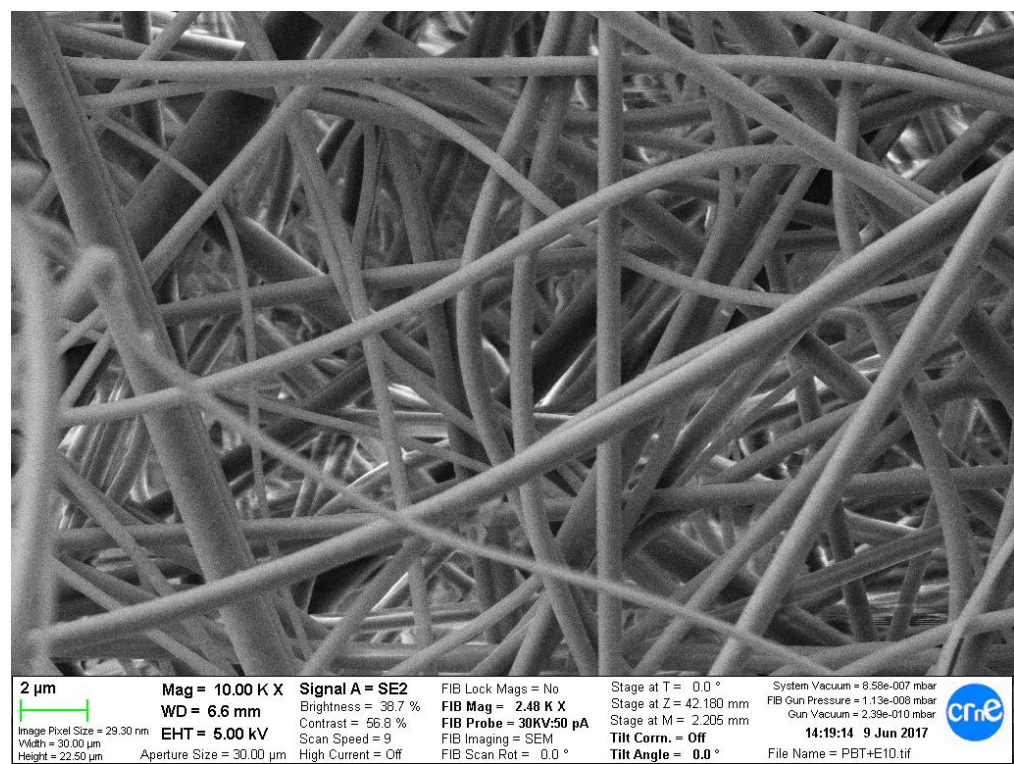















Annex C: Fulls de seguretat

- Cloroform

Safety Data Sheet	
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3	
Effective date : 02.12.2015	Page 1 of 8
Chloroform, Reagent Grade	
SECTION 1 : Identification of the substance/mixture and of the supplier	
Product name :	Chloroform, Reagent Grade
Manufacturer/Supplier Trade name:	
Manufacturer/Supplier Article number:	S25248
Recommended uses of the product and uses restrictions on use:	
Manufacturer Details:	
AquaPhoenix Scientific 9 Barnhart Drive, Hanover, PA 17331	
Supplier Details:	
Fisher Science Education 15 Jet View Drive, Rochester, NY 14624	
Emergency telephone number:	
Fisher Science Education Emergency Telephone No.: 800-535-5053	
SECTION 2 : Hazards identification	
Classification of the substance or mixture:	
	Health hazard Specific target organ toxicity following repeated exposure, category 1 Reproductive toxicity, category 2 Carcinogenicity, category 2
	Irritant Acute toxicity (oral, dermal, inhalation), category 4 Skin irritation, category 2 Eye irritation, category 2A
	Toxic Acute toxicity (oral, dermal, inhalation), category 3
Acute toxicity - Oral - Acute Tox. 4 Acute toxicity - Inhalation - Acute Tox. 3 Skin corrosion/irritation - Skin Irrit. 2. Serious Eye Damage/Eye Irritation - Eye Irrit. 2 Carcinogenicity - Carc. 2 Reproductive Toxicity - Repr. 2 Specific target organ toxicity - Repeated exposure - STOT RE 1	
Signal word : Danger	
Hazard statements:	
Harmful if swallowed Causes skin irritation Causes serious eye irritation Toxic if inhaled Suspected of causing cancer Suspected of damaging fertility or the unborn child	

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 2 of 8

Chloroform, Reagent Grade

Causes damage to organs through prolonged or repeated exposure

Precautionary statements:

If medical advice is needed, have product container or label at hand

Keep out of reach of children

Read label before use

Do not handle until all safety precautions have been read and understood

Obtain special instructions before use

Avoid breathing dust/fume/gas/mist/vapours/spray

Use only outdoors or in a well-ventilated area

Use personal protective equipment as required

Wash skin thoroughly after handling

Do not eat, drink or smoke when using this product

Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection

Call a POISON CENTER or doctor/physician

If skin irritation occurs: Get medical advice/attention

IF SWALLOWED: Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell

IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing

IF exposed or concerned: Get medical advice/attention

Get Medical advice/attention if you feel unwell

Specific treatment (see supplemental first aid instructions on this label)

Rinse mouth

Take off contaminated clothing and wash before reuse

IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses if present and easy to do.

Continue rinsing

If eye irritation persists get medical advice/attention

IF ON SKIN: Wash with soap and water

Store in a well ventilated place. Keep container tightly closed

Store locked up

Dispose of contents and container as instructed in Section 13

Other Non-GHS Classification:

WHMIS



NFPA/HMIS



NFPA SCALE (0-4)

Health	2
Flammability	0
Physical Hazard	0
Personal Protection	X

HMIS RATINGS (0-4)

SECTION 3 : Composition/information on ingredients

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 3 of 8

Chloroform, Reagent Grade

Ingredients:

CAS 67-66-3	Chloroform	100 %
Percentages are by weight		

SECTION 4 : First aid measures

Description of first aid measures

After inhalation: Loosen clothing as necessary and position individual in a comfortable position. Move exposed to fresh air. Give artificial respiration if necessary. If breathing is difficult give oxygen. Get medical assistance if cough or other symptoms appear. DO NOT use mouth-to-mouth resuscitation

After skin contact: Rinse/flush exposed skin gently using soap and water for 15-20 minutes. Seek medical advice if discomfort or irritation persists.

After eye contact: Protect unexposed eye. Rinse/flush exposed eye(s) gently using water for 15-20 minutes. Remove contact lens(es) if able to do so during rinsing. Seek medical attention if irritation persists or if concerned.

After swallowing: Rinse mouth thoroughly. Do not induce vomiting. Seek medical attention if irritation, discomfort, or vomiting persists. Never give anything by mouth to an unconscious person. Call Poison Control immediately

Most important symptoms and effects, both acute and delayed:

Aspiration hazard. May cause central nervous system effects. May cause gastrointestinal irritation, nausea, vomiting and diarrhea. Irritation- all routes of exposure. May cause irritation of respiratory tract. Inhalation may cause central nervous system effects. Headache. Shortness of breath. Possible cancer hazard. Tumorigenic effects have been reported in experimental animals. May cause adverse liver and kidney effects. Central nervous system disorders. Cardiovascular. Preexisting eye disorders. Kidney disorders. Liver disorders. Skin disorders

Indication of any immediate medical attention and special treatment needed:

If seeking medical attention provide SDS document to physician. Physician should treat symptomatically.

SECTION 5 : Firefighting measures

Extinguishing media

Suitable extinguishing agents: Use water, dry chemical, chemical foam, carbon dioxide, or alcohol-resistant foam.

For safety reasons unsuitable extinguishing agents:

Special hazards arising from the substance or mixture:

Thermal decomposition can lead to release of irritating gases and vapors. Slight fire hazard when subjected to high heat

Advice for firefighters:

Protective equipment: Wear protective eyewear, gloves, and clothing. Refer to Section 8. Use NIOSH-approved respiratory protection/breathing apparatus.

Additional information (precautions): Avoid inhaling gases, fumes, dust, mist, vapor, and aerosols. Avoid contact with skin, eyes, and clothing.

SECTION 6 : Accidental release measures

Personal precautions, protective equipment and emergency procedures:

Ensure adequate ventilation. Ensure that air-handling systems are operational.

Environmental precautions:

Created by Global Safety Management, Inc. - Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 4 of 8

Chloroform, Reagent Grade

Should not be released into environment.Prevent from reaching drains, sewer, or waterway.

Methods and material for containment and cleaning up:

Wear protective eyeware, gloves, and clothing. Refer to Section 8.Always obey local regulations.Containerize for disposal. Refer to Section 13.If necessary use trained response staff or contractor. Evacuate personnel to safe areas. Keep in suitable closed containers for disposal.

Reference to other sections:

SECTION 7 : Handling and storage

Precautions for safe handling:

Avoid contact with skin, eyes, and clothing.Follow good hygiene procedures when handling chemical materials. Refer to Section 8.Follow proper disposal methods. Refer to Section 13.Do not eat, drink, smoke, or use personal products when handling chemical substances.

Conditions for safe storage, including any incompatibilities:

Store in a cool location. Keep away from food and beverages.Protect from freezing and physical damage.Provide ventilation for containers. Keep container tightly sealed.Store away from incompatible materials.

SECTION 8 : Exposure controls/personal protection



Control Parameters:

67-66-3, Chloroform, ACGIH TLV: 49 mg/m3
67-66-3, Chloroform, OSHA PEL: 240 mg/m3
67-66-3, Chloroform, OSHA PEL 50 ppm Ceiling; 240 mg/m3 Ceiling
67-66-3, Chloroform, ACGIH TLV TWA: 10 ppm TWA
67-66-3, Chloroform, NIOSH REL: Ca ST 2 ppm (9.78 mg/m3) 60-minute
67-66-3, Chloroform, NIOSH IDLH: Ca 500 ppm

Appropriate Engineering controls:

Emergency eye wash fountains and safety showers should be available in the immediate vicinity of use or handling. Provide exhaust ventilation or other engineering controls to keep the airborne concentrations of vapor and mists below the applicable workplace exposure limits (Occupational Exposure Limits-OELs) indicated above.

Respiratory protection:

Not required under normal conditions of use. Where risk assessment shows air-purifying respirators are appropriate use a full-face particle respirator type N100 (US) or type P3 (EN 143) respirator cartridges as a backup to engineering controls.When necessary use NIOSH approved breathing equipment.

Protection of skin:

Select glove material impermeable and resistant to the substance.Select glove material based on rates of diffusion and degradation. Dispose of contaminated gloves after use in accordance with applicable laws and good laboratory practices.Use proper glove removal technique without touching outer surface. Avoid skin contact with used gloves.Wear protective clothing.

Eye protection:

Wear equipment for eye protection tested and approved under appropriate government standards such as NIOSH (US) or EN 166(EU).Safety glasses or goggles are appropriate eye protection.

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 5 of 8

Chloroform, Reagent Grade

General hygienic measures: Perform routine housekeeping. Wash hands before breaks and at the end of work. Avoid contact with skin, eyes, and clothing. Before wearing wash contaminated clothing.

SECTION 9 : Physical and chemical properties

Appearance (physical state,color):	Clear Liquid	Explosion limit lower:	Not determined
		Explosion limit upper:	Not determined
Odor:	Aromatic Chloroform Odor	Vapor pressure:	213 mbar @ 20 °C
Odor threshold:	Not determined	Vapor density:	4.12 (Air = 1.0)
pH-value:	Not determined	Relative density:	Not determined
Melting/Freezing point:	-63°C / -81.4°F	Solubilities:	Slightly soluble
Boiling point/Boiling range:	60.5 - 61.5°C / 140.9 - 142.7°F	Partition coefficient (n-octanol/water):	Not determined
Flash point (closed cup):	Not determined	Auto/Self-ignition temperature:	Not determined
Evaporation rate:	11.6 (Butyl Acetate = 1.0)	Decomposition temperature:	290°C
Flammability (solid,gaseous):	Not determined	Viscosity:	a. Kinematic: Not determined b. Dynamic: Not determined
Density: Not determined Specific Gravity: 1.480			

SECTION 10 : Stability and reactivity

Reactivity: Nonreactive under normal conditions.

Chemical stability: Stable under normal conditions. Light sensitive

Possible hazardous reactions: None under normal processing.

Conditions to avoid: Incompatible materials. Excess heat

Incompatible materials: Alkali metals, strong caustics and oxidizers

Hazardous decomposition products: Oxides of sodium. Emits very toxic fumes of chlorine and phosgene gas

SECTION 11 : Toxicological information

Acute Toxicity:		
Oral:	67-66-3	LD50 oral-rat: 695mg/kg
Chronic Toxicity:		
Inhalation:	67-66-3	May cause adverse liver effects. May cause adverse kidney effects
Corrosion Irritation: No additional information.		
Sensitization:	No additional information.	

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 6 of 8

Chloroform, Reagent Grade

Single Target Organ (STOT):	No additional information.
Numerical Measures:	No additional information.
Carcinogenicity:	Possible cancer hazard based on tests with laboratory animals.: Tumorigenic effects have been reported in experimental animals.. OSHA: Carcinogen (67-66-3)
Mutagenicity:	Mutagenic effects have occurred in experimental animals
Reproductive Toxicity:	Experiments have shown reproductive toxicity effects on laboratory animals. Developmental effects have occurred in experimental animals.Teratogenic effects have occurred in experimental animals

SECTION 12 : Ecological information

Ecotoxicity Persistence and degradability:

Bioaccumulative potential:

Mobility in soil: log Pow: 2

Other adverse effects: Chloroform has moderate acute and chronic toxicity to aquatic life, especially brittle roots and chromosomal damage

SECTION 13 : Disposal considerations

Waste disposal recommendations:

Contact a licensed professional waste disposal service to dispose of this material.U.S. - RCRA (Resource Conservation & Recovery Act) - U Series Wastes - Acutely Toxic Wastes & Other Hazardous Characteristics waste number U044 (Chloroform) . U.S. - RCRA (Resource Conservation & Recovery Act) - Basis for Listing - Appendix VII Included in waste streams: F024, F025, F039, K009, K010, K019, K020, K021, K029, K073, K116, K149, K150, K151, K158 (Chloroform) . U.S. - RCRA (Resource Conservation & Recovery Act) - D Series Wastes - Max Conc of Contaminants for the Tox Characteristic 6.0 mg/L regulatory level (Chloroform) . Dispose of empty containers as unused product.Product or containers must not be disposed with household garbage. It is the responsibility of the waste generator to properly characterize all waste materials according to applicable regulatory entities (US 40CFR262.11). Chemical waste generators must determine whether a discarded chemical is classified as a hazardous waste. Chemical waste generators must also consult local, regional, and national hazardous waste regulations. Ensure complete and accurate classification.

SECTION 14 : Transport information

UN-Number

1888

UN proper shipping name

Poisonous material, Chloroform

Transport hazard class(es)



Class:
6.1 Toxic substances

Packing group:III

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 7 of 8

Chloroform, Reagent Grade**Environmental hazard:****Transport in bulk:****Special precautions for user:****SECTION 15 : Regulatory information****United States (USA)****SARA Section 311/312 (Specific toxic chemical listings):**

Acute, Chronic

SARA Section 313 (Specific toxic chemical listings):

67-66-3 Chloroform 0.1 % de minimis concentration

RCRA (hazardous waste code):

67-66-3 Chloroform waste code U044

TSCA (Toxic Substances Control Act):

All ingredients are listed.

CERCLA (Comprehensive Environmental Response, Compensation, and Liability Act):

67-66-3 Chloroform

Proposition 65 (California):**Chemicals known to cause cancer:**

67-66-3 Chloroform

Chemicals known to cause reproductive toxicity for females:

None of the ingredients is listed

Chemicals known to cause reproductive toxicity for males:

None of the ingredients is listed

Chemicals known to cause developmental toxicity:

67-66-3 Chloroform

Canada**Canadian Domestic Substances List (DSL):**

All ingredients are listed.

Canadian NPRI Ingredient Disclosure list (limit 0.1%):

67-66-3 Chloroform

Canadian NPRI Ingredient Disclosure list (limit 1%):

None of the ingredients is listed

SECTION 16 : Other information

This product has been classified in accordance with hazard criteria of the Controlled Products Regulations and the SDS contains all the information required by the Controlled Products Regulations. Note: The responsibility to provide a safe workplace remains with the user. The user should consider the health hazards and safety information contained herein as a guide and should take those precautions required in an individual operation to instruct employees and develop work practice procedures for a safe work environment. The information contained herein is, to the best of our knowledge and belief, accurate. However, since the conditions of handling and use are beyond our control, we make no guarantee of results, and assume no liability for damages incurred by the use of this material. It is the responsibility of the user to comply with all applicable laws and regulations applicable to this

Created by Global Safety Management, Inc. - Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 02.12.2015

Page 8 of 8

Chloroform, Reagent Grade

material.

GHS Full Text Phrases:

Abbreviations and acronyms:

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods
IATA: International Air Transport Association
GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals
ACGIH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists
CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)
NFPA: National Fire Protection Association (USA)
HMIS: Hazardous Materials Identification System (USA)
WHMIS: Workplace Hazardous Materials Information System (Canada)
DNEL: Derived No-Effect Level (REACH)
PNEC: Predicted No-Effect Concentration (REACH)
CFR: Code of Federal Regulations (USA)
SARA: Superfund Amendments and Reauthorization Act (USA)
RCRA: Resource Conservation and Recovery Act (USA)
TSCA: Toxic Substances Control Act (USA)
NPRI: National Pollutant Release Inventory (Canada)
DOT: US Department of Transportation

Effective date : 02.12.2015

Last updated : 03.19.2015

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

- Àcid trifluoroacètic



SAFETY DATA SHEET

Creation Date 21-Sep-2009

Revision Date 24-May-2017

Revision Number 3

1. Identification

Product Name Trifluoroacetic acid

Cat No. : A116-05AMP; A116-1AMP; A116-10X1AMP; A116-2AMP; A116-50

Synonyms TFA; Trifluoroethanoic acid; Perfluoroacetic acid

Recommended Use Laboratory chemicals.

Uses advised against Not for food, drug, pesticide or biocidal product use

Details of the supplier of the safety data sheet

Company

Fisher Scientific
One Reagent Lane
Fair Lawn, NJ 07410
Tel: (201) 796-7100

Emergency Telephone Number

CHEMTREC®, Inside the USA: 800-424-9300
CHEMTREC®, Outside the USA: 001-703-527-3887

2. Hazard(s) identification

Classification

This chemical is considered hazardous by the 2012 OSHA Hazard Communication Standard (29 CFR 1910.1200)

Corrosive to metals	Category 1
Acute Inhalation Toxicity - Vapors	Category 4
Skin Corrosion/Irritation	Category 1 A
Serious Eye Damage/Eye Irritation	Category 1
Specific target organ toxicity (single exposure)	Category 3
Target Organs - Respiratory system, Central nervous system (CNS).	
Specific target organ toxicity - (repeated exposure)	Category 2
Target Organs - Kidney, Liver.	

Label Elements

Signal Word

Danger

Hazard Statements

May be corrosive to metals
Harmful if inhaled
Causes severe skin burns and eye damage
May cause respiratory irritation
May cause drowsiness or dizziness
May cause damage to organs through prolonged or repeated exposure

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017



Precautionary Statements

Prevention

Use only outdoors or in a well-ventilated area
Do not breathe dust/fume/gas/mist/vapors/spray
Wash face, hands and any exposed skin thoroughly after handling
Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection

Response

Immediately call a POISON CENTER or doctor/physician

Inhalation

IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing

Skin

IF ON SKIN (or hair): Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower
Wash contaminated clothing before reuse

Eyes

IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing

Ingestion

IF SWALLOWED: Rinse mouth. DO NOT induce vomiting

Storage

Store locked up
Store in a well-ventilated place. Keep container tightly closed

Disposal

Dispose of contents/container to an approved waste disposal plant

Hazards not otherwise classified (HNOC)

Harmful to aquatic life with long lasting effects

3. Composition / information on ingredients

Component	CAS-No	Weight %
Trifluoroacetic acid	76-05-1	>95

4. First-aid measures

Eye Contact	Rinse immediately with plenty of water, also under the eyelids, for at least 15 minutes. Immediate medical attention is required.
Skin Contact	Wash off immediately with plenty of water for at least 15 minutes. Immediate medical attention is required.
Inhalation	Move to fresh air. If breathing is difficult, give oxygen. Do not use mouth-to-mouth method if victim ingested or inhaled the substance; give artificial respiration with the aid of a pocket mask equipped with a one-way valve or other proper respiratory medical device. Immediate medical attention is required.
Ingestion	Do not induce vomiting. Call a physician or Poison Control Center immediately.
Most important symptoms/effects	Causes burns by all exposure routes. Product is a corrosive material. Use of gastric lavage or emesis is contraindicated. Possible perforation of stomach or esophagus should be investigated: Ingestion causes severe swelling, severe damage to the delicate tissue and danger of perforation

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017

Notes to Physician Treat symptomatically

5. Fire-fighting measuresSuitable Extinguishing Media CO₂, dry chemical, dry sand, alcohol-resistant foam.

Unsuitable Extinguishing Media No information available

Flash Point No information available

Method - No information available

Autoignition Temperature No information available

Explosion Limits

Upper No data available

Lower No data available

Sensitivity to Mechanical Impact No information available

Sensitivity to Static Discharge No information available

Specific Hazards Arising from the Chemical

Corrosive Material. Causes severe burns by all exposure routes.

Hazardous Combustion ProductsCarbon monoxide (CO) Carbon dioxide (CO₂) Hydrogen fluoride**Protective Equipment and Precautions for Firefighters**

As in any fire, wear self-contained breathing apparatus pressure-demand, MSHA/NIOSH (approved or equivalent) and full protective gear. Thermal decomposition can lead to release of irritating gases and vapors.

NFPAHealth
3Flammability
0Instability
0Physical hazards
N/A**6. Accidental release measures**

Personal Precautions Use personal protective equipment. Ensure adequate ventilation. Evacuate personnel to safe areas. Keep people away from and upwind of spill/leak.

Environmental Precautions Should not be released into the environment. See Section 12 for additional ecological information.

Methods for Containment and Clean Up Soak up with inert absorbent material. Keep in suitable, closed containers for disposal.

7. Handling and storage

Handling Use only under a chemical fume hood. Wear personal protective equipment. Do not get in eyes, on skin, or on clothing. Do not breathe vapors/dust. Do not ingest.

Storage Keep containers tightly closed in a dry, cool and well-ventilated place. Corrosives area. Do not store in metal containers.

8. Exposure controls / personal protectionExposure Guidelines This product does not contain any hazardous materials with occupational exposure limits established by the region specific regulatory bodies.Engineering Measures Use only under a chemical fume hood. Ensure that eyewash stations and safety showers are close to the workstation location.Personal Protective Equipment

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017

Eye/face Protection	Wear appropriate protective eyeglasses or chemical safety goggles as described by OSHA's eye and face protection regulations in 29 CFR 1910.133 or European Standard EN166.
Skin and body protection	Wear appropriate protective gloves and clothing to prevent skin exposure.
Respiratory Protection	Follow the OSHA respirator regulations found in 29 CFR 1910.134 or European Standard EN 149. Use a NIOSH/MSHA or European Standard EN 149 approved respirator if exposure limits are exceeded or if irritation or other symptoms are experienced.
Hygiene Measures	Handle in accordance with good industrial hygiene and safety practice.

9. Physical and chemical properties

Physical State	Liquid
Appearance	Clear, Colorless
Odor	pungent
Odor Threshold	No information available
pH	0.45 100 g/L aq.sol
Melting Point/Range	-15 °C / 5 °F
Boiling Point/Range	72 °C / 161.6 °F @ 760 mmHg
Flash Point	No information available
Evaporation Rate	No information available
Flammability (solid,gas)	Not applicable
Flammability or explosive limits	
Upper	No data available
Lower	No data available
Vapor Pressure	107 mbar @ 25 °C
Vapor Density	3.9
Specific Gravity	1.535
Solubility	Miscible with water
Partition coefficient; n-octanol/water	No data available
Autoignition Temperature	No information available
Decomposition Temperature	No information available
Viscosity	0.813 cP at 25 °C
Molecular Formula	C2 H F3 O2
Molecular Weight	114.02

10. Stability and reactivity

Reactive Hazard	None known, based on information available
Stability	Hygroscopic.
Conditions to Avoid	Incompatible products. Exposure to moist air or water. Exposure to light. Excess heat.
Incompatible Materials	Strong oxidizing agents, Reducing agents, Acids, Strong bases, Metals, Amines
Hazardous Decomposition Products	Carbon monoxide (CO), Carbon dioxide (CO ₂), Hydrogen fluoride
Hazardous Polymerization	Hazardous polymerization does not occur.
Hazardous Reactions	None under normal processing.

11. Toxicological information

Acute Toxicity

Product Information

Component Information

Component	LD50 Oral	LD50 Dermal	LC50 Inhalation
-----------	-----------	-------------	-----------------

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017

Trifluoroacetic acid	200-400 mg/kg (rat)	Not listed	10 mg/L/2h (rat)
----------------------	---------------------	------------	------------------

Toxicologically Synergistic Products No information available

Delayed and immediate effects as well as chronic effects from short and long-term exposure

Irritation Causes severe burns by all exposure routes

Sensitization No information available

Carcinogenicity The table below indicates whether each agency has listed any ingredient as a carcinogen.

Component	CAS-No	IARC	NTP	ACGIH	OSHA	Mexico
Trifluoroacetic acid	76-05-1	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed

Mutagenic Effects Not mutagenic in AMES Test

Reproductive Effects Experiments have shown reproductive toxicity effects on laboratory animals.

Developmental Effects Developmental effects have occurred in experimental animals.

Teratogenicity No information available.

STOT - single exposure Respiratory system Central nervous system (CNS)
STOT - repeated exposure Kidney Liver

Aspiration hazard No information available

Symptoms / effects, both acute and delayed Product is a corrosive material. Use of gastric lavage or emesis is contraindicated. Possible perforation of stomach or esophagus should be investigated: Ingestion causes severe swelling, severe damage to the delicate tissue and danger of perforation

Endocrine Disruptor Information No information available

Other Adverse Effects The toxicological properties have not been fully investigated. See actual entry in RTECS for complete information.

12. Ecological information

Ecotoxicity

Harmful to aquatic organisms, may cause long-term adverse effects in the aquatic environment. Do not empty into drains. The product contains following substances which are hazardous for the environment.

Component	Freshwater Algae	Freshwater Fish	Microtox	Water Flea
Trifluoroacetic acid	Not listed	Zebrafish: LC50: >1000 mg/L/96h	Not listed	daphnia: EC50: 55 mg/L/24h

Persistence and Degradability Persistence is unlikely based on information available.

Bioaccumulation/ Accumulation No information available.

Mobility Will likely be mobile in the environment due to its volatility.

Component	log Pow
Trifluoroacetic acid	-2.1

13. Disposal considerations

Waste Disposal Methods Chemical waste generators must determine whether a discarded chemical is classified as a hazardous waste. Chemical waste generators must also consult local, regional, and national hazardous waste regulations to ensure complete and accurate classification.

14. Transport information

DOT

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017

UN-No	UN2699
Proper Shipping Name	TRIFLUOROACETIC ACID
Hazard Class	8
Packing Group	I
TDG	
UN-No	UN2699
Proper Shipping Name	TRIFLUOROACETIC ACID
Hazard Class	8
Packing Group	I
IATA	
UN-No	UN2699
Proper Shipping Name	TRIFLUOROACETIC ACID
Hazard Class	8
Packing Group	I
IMDG/IMO	
UN-No	UN2699
Proper Shipping Name	TRIFLUOROACETIC ACID
Hazard Class	8
Packing Group	I

15. Regulatory information

All of the components in the product are on the following inventory lists:

International Inventories

Component	TSCA	DSL	NDSL	EINECS	ELINCS	NLP	PICCS	ENCS	AICS	IECSC	KECL
Trifluoroacetic acid	X	X	-	200-929-3	-		X	X	X	X	KE-3423 3 X

Legend:

X - Listed

E - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(e) Consent order under TSCA.

F - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(f) Rule under TSCA.

N - Indicates a polymeric substance containing no free-radical initiator in its inventory name but is considered to cover the designated polymer made with any free-radical initiator regardless of the amount used.

P - Indicates a commenced PMN substance

R - Indicates a substance that is the subject of a Section 6 risk management rule under TSCA.

S - Indicates a substance that is identified in a proposed or final Significant New Use Rule

T - Indicates a substance that is the subject of a Section 4 test rule under TSCA.

XU - Indicates a substance exempt from reporting under the Inventory Update Rule, i.e. Partial Updating of the TSCA Inventory Data Base Production and Site Reports (40 CFR 710(B)).

Y1 - Indicates an exempt polymer that has a number-average molecular weight of 1,000 or greater.

Y2 - Indicates an exempt polymer that is a polyester and is made only from reactants included in a specified list of low concern reactants that comprises one of the eligibility criteria for the exemption rule.

U.S. Federal Regulations

TSCA 12(b) Not applicable

SARA 313 Not applicable

SARA 311/312 Hazard Categories

Acute Health Hazard	Yes
Chronic Health Hazard	No
Fire Hazard	No
Sudden Release of Pressure Hazard	No
Reactive Hazard	No

CWA (Clean Water Act) Not applicable

Clean Air Act Not applicable

Trifluoroacetic acid

Revision Date 24-May-2017

OSHA Occupational Safety and Health Administration
Not applicable

CERCLA
Not applicable

California Proposition 65 This product does not contain any Proposition 65 chemicals

**U.S. State Right-to-Know
Regulations**

Component	Massachusetts	New Jersey	Pennsylvania	Illinois	Rhode Island
Trifluoroacetic acid	-	X	-	-	-

U.S. Department of Transportation

Reportable Quantity (RQ): N
DOT Marine Pollutant N
DOT Severe Marine Pollutant N

U.S. Department of Homeland Security
This product does not contain any DHS chemicals.

Other International Regulations

Mexico - Grade No information available

16. Other information

Prepared By Regulatory Affairs
Thermo Fisher Scientific
Email: EMSDS.RA@thermofisher.com



Creation Date 21-Sep-2009
Revision Date 24-May-2017
Print Date 24-May-2017
Revision Summary This document has been updated to comply with the US OSHA HazCom 2012 Standard replacing the current legislation under 29 CFR 1910.1200 to align with the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals (GHS).

Disclaimer

The information provided in this Safety Data Sheet is correct to the best of our knowledge, information and belief at the date of its publication. The information given is designed only as a guidance for safe handling, use, processing, storage, transportation, disposal and release and is not to be considered a warranty or quality specification. The information relates only to the specific material designated and may not be valid for such material used in combination with any other materials or in any process, unless specified in the text

End of SDS

- Acetona

Safety Data Sheet	
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3	
Effective date : 10.24.2014	Page 1 of 7
Acetone Reagent Grade	
SECTION 1 : Identification of the substance/mixture and of the supplier	
Product name :	Acetone Reagent Grade
Manufacturer/Supplier Trade name:	
Manufacturer/Supplier Article number:	S25120B
Recommended uses of the product and uses restrictions on use:	
Manufacturer Details:	
AquaPhoenix Scientific 9 Barnhart Drive, Hanover, PA 17331	
Supplier Details:	
Fisher Science Education 15 Jet View Drive, Rochester, NY 14624	
Emergency telephone number:	
Fisher Science Education Emergency Telephone No.: 800-535-5053	
SECTION 2 : Hazards identification	
Classification of the substance or mixture:	
	Flammable Flammable liquids, category 2
	Irritant Eye irritation, category 2A Specific target organ toxicity following single exposure, category 3
Flam. Liq. 2 Eye Irrit. 2A STOT SE 3	
Signal word :Danger	
Hazard statements:	
Highly flammable liquid and vapour Causes serious eye irritation May cause drowsiness or dizziness	
Precautionary statements:	
If medical advice is needed, have product container or label at hand Keep out of reach of children Read label before use Keep away from heat/sparks/open flames/hot surfaces. No smoking Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection Keep container tightly closed Ground/bond container and receiving equipment Use explosion-proof electrical/ventilating/light/equipment Use only non-sparking tools Take precautionary measures against static discharge Avoid breathing dust/fume/gas/mist/vapours/spray	

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com

Safety Data Sheet
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 2 of 7

Acetone Reagent Grade

Wash skin thoroughly after handling
 Use only outdoors or in a well-ventilated area
 IF ON SKIN (or hair): Remove/Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower
 IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing
 IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses if present and easy to do. Continue rinsing
 Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell
 If eye irritation persists get medical advice/attention
 In case of fire: Use agents recommended in section 5 for extinction
 Store in a well ventilated place. Keep container tightly closed
 Store in a well ventilated place. Keep cool
 Store locked up
 Protect from sunlight
 Dispose of contents and container to an approved waste disposal plant

Other Non-GHS Classification:**WHMIS****NFPA/HMIS**

NFPA SCALE (0-4)

Health	2
Flammability	3
Physical Hazard	0
Personal Protection	X

HMIS RATINGS (0-4)

SECTION 3 : Composition/information on ingredients

Ingredients:		
CAS 67-64-1	Acetone	100 %
Percentages are by weight		

SECTION 4 : First aid measures**Description of first aid measures**

After inhalation: Loosen clothing as necessary and position individual in a comfortable position. Move exposed to fresh air. Give artificial respiration if necessary. If breathing is difficult give oxygen. Get medical assistance if cough or other symptoms appear.

After skin contact: Rinse/flush exposed skin gently using soap and water for 15-20 minutes. Seek medical advice if discomfort or irritation persists.

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
 BARCELONATECH
 Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 3 of 7

Acetone Reagent Grade

After eye contact: Protect unexposed eye. Rinse/flush exposed eye(s) gently using water for 15-20 minutes. Remove contact lens(es) if able to do so during rinsing. Seek medical attention if irritation persists or if concerned.

After swallowing: Rinse mouth thoroughly. Do not induce vomiting. Seek medical attention if irritation, discomfort, or vomiting persists. Never give anything by mouth to an unconscious person.

Most important symptoms and effects, both acute and delayed:

Irritation. Headache. Nausea. Shortness of breath.;

Indication of any immediate medical attention and special treatment needed:

If seeking medical attention provide SDS document to physician. Physician should treat symptomatically.

SECTION 5 : Firefighting measures

Extinguishing media

Suitable extinguishing agents: Use dry chemical, chemical foam, carbon dioxide, or alcohol-resistant foam.

For safety reasons unsuitable extinguishing agents: Water may be ineffective.

Special hazards arising from the substance or mixture:

Thermal decomposition can lead to release of irritating gases and vapors. Carbon oxides. Vapors can flow to distant ignition sources and flashback

Advice for firefighters:

Protective equipment: Wear protective eyewear, gloves, and clothing. Refer to Section 8. Use NIOSH-approved respiratory protection/breathing apparatus.

Additional information (precautions): Avoid inhaling gases, fumes, dust, mist, vapor, and aerosols. Avoid contact with skin, eyes, and clothing.

SECTION 6 : Accidental release measures

Personal precautions, protective equipment and emergency procedures:

Ensure adequate ventilation. Ensure that air-handling systems are operational. Avoid contact with skin, eyes and clothing. Remove all sources of ignition.

Environmental precautions:

Should not be released into environment. Prevent from reaching drains, sewer, or waterway.

Methods and material for containment and cleaning up:

Wear protective eyewear, gloves, and clothing. Refer to Section 8. Always obey local regulations. Containerize for disposal. Refer to Section 13. Use spark-proof tools and explosion-proof equipment. Remove all sources of ignition. If necessary use trained response staff or contractor. Evacuate personnel to safe areas. Keep in suitable closed containers for disposal.

Reference to other sections:

SECTION 7 : Handling and storage

Precautions for safe handling:

Avoid contact with skin, eyes, and clothing. Follow good hygiene procedures when handling chemical materials. Refer to Section 8. Follow proper disposal methods. Refer to Section 13. Do not eat, drink, smoke, or use personal products when handling chemical substances. Use under a chemical fume hood. Use explosion-proof equipment.

Conditions for safe storage, including any incompatibilities:

Store in a cool location. Keep away from food and beverages. Protect from freezing and physical damage. Keep away from open flames, hot surfaces and sources of ignition. Provide ventilation for containers. Keep container

Created by Global Safety Management, Inc. - Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 4 of 7

Acetone Reagent Grade

tightly sealed.Store away from incompatible materials.

SECTION 8 : Exposure controls/personal protection



Control Parameters:

67-64-1, Acetone, ACGIH TLV TWA 1,200 mg/m³67-64-1, Acetone, OSHA PEL TWA 2,400 mg/m³

Appropriate Engineering controls:

Emergency eye wash fountains and safety showers should be available in the immediate vicinity of use or handling. Provide exhaust ventilation or other engineering controls to keep the airborne concentrations of vapor and mists below the applicable workplace exposure limits (Occupational Exposure Limits-OELs) indicated above.Use under a chemical fume hood.

Respiratory protection:

Not required under normal conditions of use. Where risk assessment shows air-purifying respirators are appropriate use a full-face particle respirator type N100 (US) or type P3 (EN 143) respirator cartridges as a backup to engineering controls.When necessary use NIOSH approved breathing equipment.

Protection of skin:

Select glove material impermeable and resistant to the substance.Select glove material based on rates of diffusion and degradation. Dispose of contaminated gloves after use in accordance with applicable laws and good laboratory practices.Use proper glove removal technique without touching outer surface. Avoid skin contact with used gloves.Wear protective clothing.

Eye protection:

Wear equipment for eye protection tested and approved under appropriate government standards such as NIOSH (US) or EN 166(EU).Safety glasses or goggles are appropriate eye protection.

General hygienic measures:

Perform routine housekeeping. Wash hands before breaks and at the end of work. Avoid contact with skin, eyes, and clothing.Before wearing wash contaminated clothing.

SECTION 9 : Physical and chemical properties

Appearance (physical state,color):	Clear, colorless liquid	Explosion limit lower: Explosion limit upper:	2 %(V) 13 %(V)
Odor:	sweet	Vapor pressure:	231 mm Hg @ 25°C
Odor threshold:	Not determined	Vapor density:	0.791 g/cm ³ at 25 °C (77 °F)
pH-value:	7	Relative density:	Not determined
Melting/Freezing point:	-94 °C (-137 °F)	Solubilities:	miscible in water
Boiling point/Boiling range:	56 °C (133 °F)	Partition coefficient (n-octanol/water):	log Pow: -0.24
Flash point (closed cup):	-17.0 °C (1.4 °F)	Auto/Self-ignition temperature:	465.0 °C (869.0 °F)
Evaporation rate:	0.1	Decomposition temperature:	Not determined

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 5 of 7

Acetone Reagent Grade

Flammability (solid,gaseous):	flammable liquid	Viscosity:	a. Kinematic: Not determined b. Dynamic: Not determined
Density: Not determined			

SECTION 10 : Stability and reactivity

Reactivity: Nonreactive under normal conditions.

Chemical stability: Stable under normal conditions.

Possible hazardous reactions: Acetone reacts violently with phosphorous oxychloride. Vapours may form explosive mixture with air.

Conditions to avoid: Incompatible materials. Heat, Sparks, Open Flames. Direct Sunlight

Incompatible materials: Strong oxidizing agents. Strong reducing agents. Strong Bases. Nitric acid. sulfur dichloride potassium tert-butoxide. hexachloromelamine. chloroform. alkali, sulfuric acid

Hazardous decomposition products: Carbon oxides.

SECTION 11 : Toxicological information

Acute Toxicity:		
Oral:	67-64-1 (acetone)	LD50 Rat: 5800 mg/kg
Inhalation:	67-64-1 (acetone)	LD50 Rat: 50100 mg/m3/8 h
Dermal:	67-64-1 (acetone)	LD50 Rabbit: 20000 mg/kg
Chronic Toxicity: No additional information.		
Corrosion Irritation:		
Ocular:	67-64-1 (acetone)	Rabbit: Mild Eye Irritation - 24 - h
Dermal:	67-64-1 (acetone)	Rabbit: Mild Skin Irritation - 24 h
Sensitization:	guinea pig - Does not cause skin sensitisation.	
Single Target Organ (STOT):	May cause drowsiness or dizziness.	
Numerical Measures:	No additional information.	
Carcinogenicity:	Not listed as a carcinogen (ACGIH, IARC, NTP): 67-64-1 (acetone)	
Mutagenicity:	No additional information.	
Reproductive Toxicity:	No additional information.	

SECTION 12 : Ecological information

Ecotoxicity

Fish LC50 - Oncorhynchus mykiss (rainbow trout) - 5,540 mg/l - 96 h: 67-64-1 (acetone)

Invertebrates EC50 - Daphnia magna (Water flea) - 8,800 mg/l - 48 h: 67-64-1 (acetone)

Persistence and degradability: Readily biodegradable.

Bioaccumulative potential: Not Bioaccumulative.

Mobility in soil: Aqueous solution has high mobility in soil.

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet

according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 6 of 7

Acetone Reagent Grade

Other adverse effects: None identified.

SECTION 13 : Disposal considerations

Waste disposal recommendations:

Contact a licensed professional waste disposal service to dispose of this material. Dispose of empty containers as unused product. Product or containers must not be disposed with household garbage. It is the responsibility of the waste generator to properly characterize all waste materials according to applicable regulatory entities (US 40CFR262.11). Chemical waste generators must determine whether a discarded chemical is classified as a hazardous waste. Chemical waste generators must also consult local, regional, and national hazardous waste regulations. Ensure complete and accurate classification.

SECTION 14 : Transport information

UN-Number

1090

UN proper shipping name

Acetone

Transport hazard class(es)



Class:

3 Flammable liquids

Packing group:II

Environmental hazard:

Transport in bulk:

Special precautions for user:

SECTION 15 : Regulatory information

United States (USA)

SARA Section 311/312 (Specific toxic chemical listings):

Acute, Chronic, Fire

SARA Section 313 (Specific toxic chemical listings):

None of the ingredients is listed

RCRA (hazardous waste code):

67-64-1 Acetone - U002

TSCA (Toxic Substances Control Act):

All ingredients are listed.

CERCLA (Comprehensive Environmental Response, Compensation, and Liability Act):

67-64-1 Acetone 5000 lb

Proposition 65 (California):

Chemicals known to cause cancer:

None of the ingredients is listed

Chemicals known to cause reproductive toxicity for females:

None of the ingredients is listed

Chemicals known to cause reproductive toxicity for males:

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

Safety Data Sheet
according to 29CFR1910/1200 and GHS Rev. 3

Effective date : 10.24.2014

Page 7 of 7

Acetone Reagent Grade

None of the ingredients is listed

Chemicals known to cause developmental toxicity:

None of the ingredients is listed

Canada

Canadian Domestic Substances List (DSL):

All ingredients are listed.

Canadian NPRI Ingredient Disclosure list (limit 0.1%):

None of the ingredients is listed

Canadian NPRI Ingredient Disclosure list (limit 1%):

67-64-1 Acetone

SECTION 16 : Other information

This product has been classified in accordance with hazard criteria of the Controlled Products Regulations and the SDS contains all the information required by the Controlled Products Regulations. Note: The responsibility to provide a safe workplace remains with the user. The user should consider the health hazards and safety information contained herein as a guide and should take those precautions required in an individual operation to instruct employees and develop work practice procedures for a safe work environment. The information contained herein is, to the best of our knowledge and belief, accurate. However, since the conditions of handling and use are beyond our control, we make no guarantee of results, and assume no liability for damages incurred by the use of this material. It is the responsibility of the user to comply with all applicable laws and regulations applicable to this material.

GHS Full Text Phrases:

Abbreviations and acronyms:

IMDG: International Maritime Code for Dangerous Goods
IATA: International Air Transport Association
GHS: Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals
ACGIH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists
CAS: Chemical Abstracts Service (division of the American Chemical Society)
NFPA: National Fire Protection Association (USA)
HMIS: Hazardous Materials Identification System (USA)
WHMIS: Workplace Hazardous Materials Information System (Canada)
DNEL: Derived No-Effect Level (REACH)
PNEC: Predicted No-Effect Concentration (REACH)
CFR: Code of Federal Regulations (USA)
SARA: Superfund Amendments and Reauthorization Act (USA)
RCRA: Resource Conservation and Recovery Act (USA)
TSCA: Toxic Substances Control Act (USA)
NPRI: National Pollutant Release Inventory (Canada)
DOT: US Department of Transportation

Effective date : 10.24.2014

Last updated : 03.23.2015

Created by Global Safety Management, Inc. -Tel: 1-813-435-5161 - www.gsmsds.com



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

• Hexafluoroisopropanol



8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

SECTION 1 IDENTIFICATION OF THE SUBSTANCE/MIXTURE AND OF THE COMPANY

- 1.1 Product Identifier
Name HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200
- 1.2 Use of Substance/Mixture
Use Analytical Reagent for Gas Chromatography
- 1.3 Details of Manufacturer/Supplier
Company Regis Technologies, Inc.
8210 N. Austin Avenue
Morton Grove, IL 60053
847-967-6000; 800-323-8144 (toll free)
Email: cservice@registech.com
www.registech.com
- 1.4 Emergency Telephone
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

SECTION 2 HAZARDS IDENTIFICATION

- 2.1 Classification of the Substance or Mixture
GHS Classification
- | | | |
|---------------------------------|-------------|------|
| Acute Toxicity (oral) | Category 4 | H302 |
| Acute Toxicity (inhalation) | Category 4 | H332 |
| Skin Corrosion / Irritation | Category 1B | H314 |
| Serious Eye Damage / Irritation | Category 1 | H318 |

GHS Label Elements
Pictograms or hazard symbols



Signal Word Danger

Hazard Statement

H302+H332 – Harmful if swallowed or inhaled.
H314 – Causes severe skin burns and eye damage.
H318 – Causes serious eye damage.

Precautionary Statements
[Prevention]

P261 – Avoid breathing vapors or mist.
P261 – Wash skin thoroughly after handling.
P271 – Use only outdoors or in a well-ventilated area.

[Response]

P280 – Wear protective gloves/eye protection/face protection.
P301+P330+P331 – IF SWALLOWED: rinse mouth. Do NOT induce vomiting.
P303+P361+P353 – IF ON SKIN (or hair): Remove/Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower.
P304+P340 – IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing.
P305+P351+P338 – IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing.

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/no data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 1 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est



8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

(Storage) P314 – Get medical advice/attention if you feel unwell.
P402+P404 – Store in a dry place. Store in a closed container.
(Disposal) P403+P235 – Store in a well-ventilated place. Keep cool.
P501 – Dispose of contents/ container to an approved waste disposal plant.

SECTION 3. COMPOSITION / INFORMATION ON INGREDIENTS

Name HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Synonyms Hexafluoroisopropanol; Hexafluoro-2-propanol

Hazardous components

Component	Classification	Concentration
1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol		
CAS No. 920-66-1	Acute Tox. 4; Skin Corr. 1B; Eye Dam. 1; H302 + H332 ; H314; H318	≥ 99.0 %
EC No. 213-059-4		
Formula C ₃ H ₂ F ₆ O		
Molecular Mass 168.04		

For full test of the H-Statements mentioned in this Section, see Section 16.

SECTION 4. FIRST AID MEASURES

4.1 Description of first aid measures

Eye contact: Rinse eyes with plenty of water for at least 15 minutes; lift eyelids occasionally. If irritation persists, consult physician.
Skin contact: Immediately remove contaminated clothing and shoes, then wash skin with soap and plenty of water. If irritation persists, consult physician.
Inhalation: Remove to fresh air. If breathing is difficult, give oxygen. If not breathing, give artificial respiration and keep person warm and at rest. Consult physician.
Ingestion: Give large amounts of water or milk (two glasses at most). Avoid vomiting. Consult physician immediately. Do not attempt to neutralize.
Physician note: Symptomatic and supportive care. There is no specific antidote.

4.2 Most important symptoms and effects, both acute and delayed.
Causes severe skin burns and eye damage. Risk of blindness. Shortness of breath. Pupil dilation.

4.3 Indication of immediate medical attention and special treatment needed.
No information available.

SECTION 5. FIRE-FIGHTING MEASURES

5.1 Suitable Extinguishing Media

Carbon dioxide, dry chemical powder, foam.

5.2 Specific hazards arising from the chemical.

Corrosive liquid and vapor.
Water spray may be used to cool fire-exposed containers. Emits toxic fumes under fire conditions.
Produces carbon oxides, hydrogen fluoride upon combustion.

5.3 Advice for fire-fighters

Wear personal protective equipment for corrosive organic/acidic vapor conditions. Wear self-contained breathing apparatus (SCBA) if necessary.

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/No data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 2 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est



8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

SECTION 6 ACCIDENTAL RELEASE MEASURES

- 6.1 Personal precautions, protective equipment, and emergency procedures
For non-emergency personnel - Do not breath vapors or mists. Avoid material contact. Evacuate unnecessary personnel from area, observe emergency procedures, consult an expert.
For emergency responders - Protective equipment for corrosive organic/acidic vapor conditions. See Section 8.3.
- 6.2 Environmental precautions
Prevent material from entering drains.
- 6.3 Methods of clean up
Evacuate unnecessary people from area. Isolate spilled material.
Ventilate area. Eliminate all ignition sources. Use spark proof tools.
If neat or in solution, mix with sand or similar inert adsorbent material or spill pillow.
Sweep up, seal in appropriate hazardous waste container, and hold for proper waste disposal.
Keep out of water supplies and sewers. Wash spill site after material pickup is complete.

SECTION 7 HANDLING AND STORAGE

- 7.1 Safe Handling Precautions
Wear suitable protective equipment to avoid contact with skin, eyes, or inhalation of corrosive organic/acidic vapors.
Wash thoroughly after handling. Immediately remove contaminated clothing.
Handle in a dry, well ventilated area. Use local exhaust if vapor can be generated.
Keep away from ignition sources. Take precautionary measures against static discharge.
Handle under nitrogen.
- 7.2 Storage Conditions
Store under inert gas in a tightly sealed container. Store in a cool, dry place suitable for corrosive materials, away from incompatibilities.

SECTION 8 EXPOSURE CONTROLS / PERSONAL PROTECTION

- 8.1 Control parameters
Exposure limits No data available
Environmental Do not empty into drains.
- 8.2 Appropriate engineering controls
Safety shower and eye wash
Local exhaust and mechanical ventilation required. Hood recommended. Fume scrubber.
- 8.3 Personal protection
Eye/Face Chemical safety eyewear or goggles
Hand Compatible chemical-resistant gloves: Rubber (e.g., natural rubber, neoprene, nitrile, or equivalent), Silver Shield®, Viton®
Respiratory NIOSH/MSHA or European Standards approved respirator for corrosive organic/acidic vapor if exposure limits are exceeded or irritation or other symptoms are experienced.
Dermal (not hand) Protective Clothing (e.g., lab coat)-flame retardant anti-static material recommended.
Hygiene Avoid inhalation, ingestion; contact with eyes, skin, and clothing. Wash thoroughly after handling. Wash contaminated clothing before reuse. Discard contaminated footwear.

SECTION 9 PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES

- 9.1 Information on physical and chemical data

Form	liquid
Appearance	clear, colorless
Odor	strong

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/No data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 3 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est



8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

Odor threshold	No data available
pH	3-4 (aqueous solution)
Melting/freezing point	-3.3°C (26°F) (lit.)
Initial boiling point:	59°C (138°F) at 1.013 hPa (Lit.)
Flammability (liquid, solid)	
Flash Point	> 100°C (> 212°F) (Lit.)
Flammable limits (%v/v)	LEL (lower explosive limit) No data available UEL (upper explosive limit) No data available
Autoignition temperature	No data available
Decomposition temperature	No data available
OSHA Flammability Class	No data available
Evaporation Rate (BuAc = 1.0)	No data available
Vapor pressure	160 hPa (120 mm Hg) 20°C (68°F)
Vapor density (air=1):	5.8
Relative density (g/cm ³)	1.605 at 25°C (77°F)
Water Solubility	soluble at 20°C (68°F)
Water reactive	No
Solubility (other)	No data available
Partition coefficient: N-octanol/water	Log Pow 1.66
Viscosity	1.64 mPa.s 25°C (77°F)
% Volatiles	No data available

SECTION 10 STABILITY AND REACTIVITY

- 10.1 Reactivity
None known, based on available information.
- 10.2 Chemical Stability
Stable under standard ambient conditions (room temperature).
- 10.3 Possibility of hazardous reactions
No data available
- 10.4 Conditions to avoid
Avoid incompatibilities.
Protect from heat and ignition sources.
Keep out of water supplies and sewers.
- 10.5 Incompatible materials
Alkalies metals, alkaline earth metals, aluminum, finely powdered metal, acid halides, zinc
Strong acids or bases
Strong oxidizers
- 10.6 Hazardous decomposition products
Combustion carbon oxides, hydrogen fluoride

SECTION 11 TOXICOLOGICAL INFORMATION

- 11.1 Toxicological information

Acute toxicity	ori rat LD50 1500 mg/kg (RTECS)
Skin corrosion/irritation	No data available
Serious eye damage/irritation	ihl rat LC50 1974 mg/m ³ /4H (RTECS); Dilated pupils, Shortness of breath, Blood—other changes.
Respiratory irritation	No data available
Respiratory or skin sensitization	No data available
Germ cell mutagenicity	No data available

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/no data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 4 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est



REGIS[®]
TECHNOLOGIES, INC.

8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

Cardiogenicity	Multiple Ames tests performed, all with negative results (NCI CCRLS).
IARC	No data available
NTP	No data available
OSHA	No data available
Reproductive toxicity	No data available
STOT-single exposure	No data available
STOT-repeated exposure	No data available
Aspiration hazard	No data available
RTECS Number	UB6450000

11.2 Further Information

Potential health effects	
Eye	Causes serious eye damage – dilated pupils, destruction to mucous membranes, burns, risk of blindness, lacrimation (tearing).
Skin	Causes severe skin burns.
Inhalation	Harmful if inhaled. May be destructive to mucous membranes and respiratory tract. Symptoms: shortness of breath, difficulty breathing, dilated pupil.
Ingestion	Harmful if inhaled. May be destructive to mucous membranes of the GI system.
Symptoms	See above route. Pre-existing conditions that may be aggravated: not determined.
Miscellaneous	No data available

SECTION 12 ECOLOGICAL INFORMATION

Ecotoxicity	Fish Toxicity: 244 mg/L 96 hours(s) LC50 (mortality) fathead minnow (Pimephales promelas)
Persistence and degradability	No data available
Bioaccumulative potential	Log Pow: 1.66 Bioaccumulation is not expected. (lit)
Motility in soil	No data available
Other adverse effects	No data available
General Notes	Do not empty into drains or water courses.

SECTION 13 DISPOSAL CONSIDERATIONS

13.1 Disposal methods	D002
U. S. EPA Waste Codes	RCRA Hazard Class (40CFR 261): Corrosive
Waste Characterization (per U. S. regulations)	Generator is responsible for proper waste characterization. NOTE: U. S. Federal and state hazardous waste regulations may differ considerably.
Waste Disposal	That which cannot be recovered or recycled, should be disposed of in accordance with all applicable international, national, regional, state, and local laws. Do NOT dump into any sewer, on ground, or into any body of water.

SECTION 14 TRANSPORT INFORMATION

14.1 UN number	UN1760
14.2 UN proper shipping name	Corrosive Liquids, n.o.s. (1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-propanol)
14.3 Transport Hazard Class	8
14.5 Packing group	PG II
14.6 Environmental hazards	Not applicable
14.6 Special precautions for user	See Section 8 for exposure/personal protection guidance.

SECTION 15 REGULATORY INFORMATION

15.1 Safety, health and Environmental regulations specific for the product in question.

NFPA: H3 F0 R0 HMIS: H3 F0 R0

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/no data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 5 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est



8210 N. Austin Avenue, Morton Grove, IL 60053-3205, U.S.A.
847-967-6000 800-323-8144
(Monday - Friday: 7:30 a.m. - 4:00 p.m. CST)

Emergency Contact:
INFOTRAC 800-535-5053 [U.S.A.]

Name: HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
Code: 1-270700-500, 1-270701-200, 1-270702-200, 1-270703-200, 1-270704-200

SAFETY DATA SHEET

15.2 Chemical Inventory Lists

Reviews, Standards, and Regulations

HFIP or 1,1,1,3,3,3-Hexafluoro-2-Propanol
CAS number 920-66-1
TSCA: Y
This compound is sold strictly for FDA or research and development use.....
EINECS: Y
Number 213-059-4
CERCLA [Section 103 (40 CFR 302.4)]: NL
RQ (lbs) NA
RCRA Waste Code NA
OSHA Process Safety [29 CFR 1910.119]: NL
TQ (lbs) NA
Clean Air Act
[Section 112r (40 CFR 68)]: NL
TQ (lbs) NA
Contains Ozone Depleters (Class I or Class II): N
SARA Title III Notification [40 CFR 302.4]:
Section 302/304 (EHS) Ingredient
[40 CFR 355.3] NL
TPQ (lbs) NA
RQ (lbs) NA
Section 313 Ingredient [40 CFR 372.65] NL
SARA Hazards Acute.....Y Chronic..... N Fire.....N Pressure..... N ReactivityN
State Lists: NL
States NL
On CA 65 Significant Risk Level NL

SECTION 16 OTHER INFORMATION

16.1 Full test of H-Statements referred to under Section 2 and 3.

Acute Tox.	Acute Toxicity
Eye Dam.	Serious eye damage
H302 + H332	Harmful if swallowed or if inhaled
H314	Causes severe skin burns and eye damage
H318	Causes serious eye damage
Skin Corr.	Skin corrosion

The above information is believed to be correct to the best of our present state knowledge, but does not purport to be all-inclusive and shall be used only as a guide. It characterizes the product with regard to the appropriate safety precautions. It does not represent a guarantee of any properties of the product.

Prepared by: Regis Technologies

This is the last page of this MSDS.

Abbreviations: NA—not applicable; NE—not established; U—unknown/No data available; NL—not listed; N—no; Y—yes.

MSDS# 270700c

Updated Last: 03/31/15

Version #: 3

Page 6 of 6



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

- Dimetil carbonat

ThermoFisher
SCIENTIFIC

SAFETY DATA SHEET

Creation Date 22-Oct-2009

Revision Date 30-May-2017

Revision Number 3

1. Identification

Product Name Dimethyl carbonate
Cat No. : AC428730000; AC428730010; AC428731000
Synonyms Methyl carbonate
Recommended Use Laboratory chemicals.
Uses advised against Not for food, drug, pesticide or biocidal product use

Details of the supplier of the safety data sheet

Company

Fisher Scientific
One Reagent Lane
Fair Lawn, NJ 07410
Tel: (201) 796-7100

Acros Organics
One Reagent Lane
Fair Lawn, NJ 07410

Emergency Telephone Number

For information **US** call: 001-800-ACROS-01 / **Europe** call: +32 14 57 52 11
Emergency Number **US**:001-201-796-7100 / **Europe**: +32 14 57 52 99
CHEMTREC Tel. No **US**:001-800-424-9300 / **Europe**:001-703-527-3887

2. Hazard(s) identification

Classification

This chemical is considered hazardous by the 2012 OSHA Hazard Communication Standard (29 CFR 1910.1200)

Flammable liquids

Category 2

Label Elements

Signal Word

Danger

Hazard Statements

Highly flammable liquid and vapor



Precautionary Statements

Prevention

Keep away from heat/sparks/open flames/hot surfaces. - No smoking

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

Keep container tightly closed

Ground/bond container and receiving equipment

Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/equipment

Use only non-sparking tools

Take precautionary measures against static discharge

Wear protective gloves/protective clothing/eye protection/face protection

Skin

IF ON SKIN (or hair): Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower

Fire

In case of fire: Use CO₂, dry chemical, or foam for extinction

Storage

Store in a well-ventilated place. Keep cool

Disposal

Dispose of contents/container to an approved waste disposal plant

Hazards not otherwise classified (HNOC)

None identified

3. Composition / information on ingredients

Component	CAS-No	Weight %
Dimethyl carbonate	616-38-6	>95

4. First-aid measures

Eye Contact	Rinse immediately with plenty of water, also under the eyelids, for at least 15 minutes. Obtain medical attention.
Skin Contact	Wash off immediately with plenty of water for at least 15 minutes. Obtain medical attention.
Inhalation	Move to fresh air. If not breathing, give artificial respiration. Obtain medical attention.
Ingestion	Do not induce vomiting. Obtain medical attention.
Most important symptoms/effects	Breathing difficulties. Inhalation of high vapor concentrations may cause symptoms like headache, dizziness, tiredness, nausea and vomiting
Notes to Physician	Treat symptomatically

5. Fire-fighting measures

Suitable Extinguishing Media	Use water spray, alcohol-resistant foam, dry chemical or carbon dioxide. Cool closed containers exposed to fire with water spray.
Unsuitable Extinguishing Media	No information available
Flash Point	18 °C / 64.4 °F
Method -	No information available
Autoignition Temperature	458 °C / 856.4 °F
Explosion Limits	
Upper	12.87 vol %
Lower	4.22 vol %
Sensitivity to Mechanical Impact	No information available
Sensitivity to Static Discharge	No information available

Specific Hazards Arising from the Chemical

Flammable. Containers may explode when heated. Vapors may form explosive mixtures with air. Vapors may travel to source of

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

ignition and flash back.

Hazardous Combustion ProductsCarbon monoxide (CO) Carbon dioxide (CO₂)**Protective Equipment and Precautions for Firefighters**

As in any fire, wear self-contained breathing apparatus pressure-demand, MSHA/NIOSH (approved or equivalent) and full protective gear.

NFPAHealth
0Flammability
3Instability
1Physical hazards
N/A**6. Accidental release measures****Personal Precautions**

Use personal protective equipment. Remove all sources of ignition. Take precautionary measures against static discharges.

Environmental Precautions

Should not be released into the environment. See Section 12 for additional ecological information.

Methods for Containment and Clean Up

Soak up with inert absorbent material. Keep in suitable, closed containers for disposal. Remove all sources of ignition. Use spark-proof tools and explosion-proof equipment.

7. Handling and storage**Handling**

Ensure adequate ventilation. Wear personal protective equipment. Avoid contact with skin, eyes and clothing. Avoid ingestion and inhalation. Keep away from open flames, hot surfaces and sources of ignition. Use only non-sparking tools. Use explosion-proof equipment. To avoid ignition of vapors by static electricity discharge, all metal parts of the equipment must be grounded. Take precautionary measures against static discharges.

Storage

Keep containers tightly closed in a dry, cool and well-ventilated place. Flammables area. Keep away from heat and sources of ignition. Store under an inert atmosphere.

8. Exposure controls / personal protection**Exposure Guidelines**

This product does not contain any hazardous materials with occupational exposure limits established by the region specific regulatory bodies.

Engineering Measures

Ensure that eyewash stations and safety showers are close to the workstation location. Ensure adequate ventilation, especially in confined areas. Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/equipment.

Personal Protective Equipment**Eye/face Protection**

Wear appropriate protective eyeglasses or chemical safety goggles as described by OSHA's eye and face protection regulations in 29 CFR 1910.133 or European Standard EN166.

Skin and body protection

Wear appropriate protective gloves and clothing to prevent skin exposure.

Respiratory Protection

Follow the OSHA respirator regulations found in 29 CFR 1910.134 or European Standard EN 149. Use a NIOSH/MSHA or European Standard EN 149 approved respirator if exposure limits are exceeded or if irritation or other symptoms are experienced.

Hygiene Measures

Handle in accordance with good industrial hygiene and safety practice.

9. Physical and chemical properties**Physical State**

Liquid

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

Appearance	Clear
Odor	Characteristic
Odor Threshold	No information available
pH	No information available
Melting Point/Range	2 - 4 °C / 35.6 - 39.2 °F
Boiling Point/Range	90 °C / 194 °F @ 760 mmHg
Flash Point	18 °C / 64.4 °F
Evaporation Rate	No information available
Flammability (solid,gas)	Not applicable
Flammability or explosive limits	
Upper	12.87 vol %
Lower	4.22 vol %
Vapor Pressure	53 mbar @ 20 °C
Vapor Density	3.1 (Air = 1.0)
Specific Gravity	1.069
Solubility	soluble
Partition coefficient; n-octanol/water	No data available
Autoignition Temperature	458 °C / 856.4 °F
Decomposition Temperature	No information available
Viscosity	0.625 cPs @ 20 °C
Molecular Formula	C3 H6 O3
Molecular Weight	90.08

10. Stability and reactivity

Reactive Hazard	None known, based on information available
Stability	Air sensitive.
Conditions to Avoid	Incompatible products. Excess heat. Keep away from open flames, hot surfaces and sources of ignition. Exposure to air. Exposure to moist air or water.
Incompatible Materials	Acids, Bases, Oxidizing agents, Reducing agents
Hazardous Decomposition Products	Carbon monoxide (CO), Carbon dioxide (CO ₂)
Hazardous Polymerization	No information available.
Hazardous Reactions	None under normal processing.

11. Toxicological information

Acute Toxicity

Product Information See actual entry in RTECS for complete information.

Component Information

Component	LD50 Oral	LD50 Dermal	LC50 Inhalation
Dimethyl carbonate	LD50 = 13 g/kg (Rat)	LD50 > 5 g/kg (Rabbit)	LC50 = 140 mg/L (Rat) 4 h

Toxicologically Synergistic Products No information available

Delayed and immediate effects as well as chronic effects from short and long-term exposure

Irritation No information available

Sensitization No information available

Carcinogenicity The table below indicates whether each agency has listed any ingredient as a carcinogen.

Component	CAS-No	IARC	NTP	ACGIH	OSHA	Mexico
Dimethyl carbonate	616-38-6	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

Mutagenic Effects	No information available
Reproductive Effects	No information available.
Developmental Effects	No information available.
Teratogenicity	No information available.
STOT - single exposure	None known
STOT - repeated exposure	None known
Aspiration hazard	No information available
Symptoms / effects, both acute and delayed	Inhalation of high vapor concentrations may cause symptoms like headache, dizziness, tiredness, nausea and vomiting
Endocrine Disruptor Information	No information available
Other Adverse Effects	The toxicological properties have not been fully investigated.

12. Ecological information

Ecotoxicity

Do not empty into drains. .

Persistence and Degradability	Soluble in water Persistence is unlikely based on information available.
Bioaccumulation/ Accumulation	No information available.
Mobility	Will likely be mobile in the environment due to its water solubility.

Component	log Pow
Dimethyl carbonate	0.354

13. Disposal considerations

Waste Disposal Methods	Should not be released into the environment.
------------------------	--

14. Transport information

DOT

UN-No	UN1161
Proper Shipping Name	DIMETHYL CARBONATE
Hazard Class	3
Packing Group	II

TDG

UN-No	UN1161
Proper Shipping Name	DIMETHYL CARBONATE
Hazard Class	3
Packing Group	II

IATA

UN-No	UN1161
Proper Shipping Name	DIMETHYL CARBONATE
Hazard Class	3
Packing Group	II

IMDG/IMO

UN-No	UN1161
Proper Shipping Name	DIMETHYL CARBONATE
Hazard Class	3
Packing Group	II

15. Regulatory information

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

All of the components in the product are on the following Inventory lists: X = listed

International Inventories

Component	TSCA	DSL	NDSL	EINECS	ELINCS	NLP	PICCS	ENCS	AICS	IECSC	KECL
Dimethyl carbonate	X	X	-	210-478-4	-		X	X	X	X	X

Legend:

X - Listed

E - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(e) Consent order under TSCA.

F - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(f) Rule under TSCA.

N - Indicates a polymeric substance containing no free-radical initiator in its inventory name but is considered to cover the designated polymer made with any free-radical initiator regardless of the amount used.

P - Indicates a commenced PMN substance

R - Indicates a substance that is the subject of a Section 6 risk management rule under TSCA.

S - Indicates a substance that is identified in a proposed or final Significant New Use Rule

T - Indicates a substance that is the subject of a Section 4 test rule under TSCA.

XU - Indicates a substance exempt from reporting under the Inventory Update Rule, i.e. Partial Updating of the TSCA Inventory Data Base Production and Site Reports (40 CFR 710(B)).

Y1 - Indicates an exempt polymer that has a number-average molecular weight of 1,000 or greater.

Y2 - Indicates an exempt polymer that is a polyester and is made only from reactants included in a specified list of low concern reactants that comprises one of the eligibility criteria for the exemption rule.

U.S. Federal Regulations

TSCA 12(b) Not applicable

SARA 313 Not applicable

SARA 311/312 Hazard Categories

Acute Health Hazard	No
Chronic Health Hazard	No
Fire Hazard	Yes
Sudden Release of Pressure Hazard	No
Reactive Hazard	No

CWA (Clean Water Act) Not applicable

Clean Air Act Not applicable

OSHA Occupational Safety and Health Administration
Not applicable

CERCLA

Not applicable

California Proposition 65 This product does not contain any Proposition 65 chemicals

U.S. State Right-to-Know Regulations

Component	Massachusetts	New Jersey	Pennsylvania	Illinois	Rhode Island
Dimethyl carbonate	X	X	X	-	-

U.S. Department of Transportation

Reportable Quantity (RQ):	N
DOT Marine Pollutant	N
DOT Severe Marine Pollutant	N

U.S. Department of Homeland Security

This product does not contain any DHS chemicals.

Dimethyl carbonate

Revision Date 30-May-2017

Other International Regulations

Mexico - Grade Serious risk, Grade 3

16. Other information

Prepared By Regulatory Affairs
Thermo Fisher Scientific
Email: EMSDS.RA@thermofisher.com

Creation Date 22-Oct-2009

Revision Date 30-May-2017

Print Date 30-May-2017

Revision Summary This document has been updated to comply with the US OSHA HazCom 2012 Standard replacing the current legislation under 29 CFR 1910.1200 to align with the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals (GHS).

Disclaimer

The information provided in this Safety Data Sheet is correct to the best of our knowledge, information and belief at the date of its publication. The information given is designed only as a guidance for safe handling, use, processing, storage, transportation, disposal and release and is not to be considered a warranty or quality specification. The information relates only to the specific material designated and may not be valid for such material used in combination with any other materials or in any process, unless specified in the text

End of SDS

- N,N-Dimetilformamida



SAFETY DATA SHEET

Creation Date 12-Jan-2015

Revision Date 24-May-2017

Revision Number 3

1. Identification

Product Name N,N-Dimethylformamide-d7
Cat No. : AC183600000; AC183600010; AC183600100
Synonyms No information available
Recommended Use Laboratory chemicals.
Uses advised against Not for food, drug, pesticide or biocidal product use

Details of the supplier of the safety data sheet

Company

Fisher Scientific
One Reagent Lane
Fair Lawn, NJ 07410
Tel: (201) 796-7100

Acros Organics
One Reagent Lane
Fair Lawn, NJ 07410

Emergency Telephone Number

For information **US** call: 001-800-ACROS-01 / **Europe** call: +32 14 57 52 11
Emergency Number US: 001-201-796-7100 / **Europe:** +32 14 57 52 99
CHEMTREC Tel. No **US:** 001-800-424-9300 / **Europe:** 001-703-527-3887

2. Hazard(s) identification

Classification

This chemical is considered hazardous by the 2012 OSHA Hazard Communication Standard (29 CFR 1910.1200)

Flammable liquids	Category 3
Acute dermal toxicity	Category 4
Acute Inhalation Toxicity - Vapors	Category 4
Serious Eye Damage/Eye Irritation	Category 2
Reproductive Toxicity	Category 1A

Label Elements

Signal Word

Danger

Hazard Statements

Flammable liquid and vapor
Harmful in contact with skin
Causes serious eye irritation
Harmful if inhaled
May damage the unborn child

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

**Precautionary Statements****Prevention**

Obtain special instructions before use
 Do not handle until all safety precautions have been read and understood
 Use personal protective equipment as required
 Avoid breathing dust/fume/gas/mist/vapors/spray
 Use only outdoors or in a well-ventilated area
 Wash face, hands and any exposed skin thoroughly after handling
 Wear eye/face protection
 Keep away from heat/sparks/open flames/hot surfaces. - No smoking
 Keep container tightly closed
 Ground/bond container and receiving equipment
 Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/equipment
 Use only non-sparking tools
 Take precautionary measures against static discharge

Response

IF exposed or concerned: Get medical attention/advice

Inhalation

IF INHALED: Remove victim to fresh air and keep at rest in a position comfortable for breathing

Skin

Call a POISON CENTER or doctor/physician if you feel unwell

Wash contaminated clothing before reuse

IF ON SKIN (or hair): Take off immediately all contaminated clothing. Rinse skin with water/shower

Eyes

IF IN EYES: Rinse cautiously with water for several minutes. Remove contact lenses, if present and easy to do. Continue rinsing

If eye irritation persists: Get medical advice/attention

Fire

In case of fire: Use CO₂, dry chemical, or foam for extinction

Storage

Store locked up

Store in a well-ventilated place. Keep cool

Disposal

Dispose of contents/container to an approved waste disposal plant

Hazards not otherwise classified (HNOC)

None identified

3. Composition / information on ingredients

Component	CAS-No	Weight %
N,N-D[2H ₃]methyl[2H]formamide	4472-41-7	100

4. First-aid measures

General Advice

Show this safety data sheet to the doctor in attendance. Immediate medical attention is required.

Eye Contact

Rinse immediately with plenty of water, also under the eyelids, for at least 15 minutes. In the case of contact with eyes, rinse immediately with plenty of water and seek medical advice.

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

Skin Contact	Wash off immediately with plenty of water for at least 15 minutes. Immediate medical attention is required.
Inhalation	Move to fresh air. If not breathing, give artificial respiration. Do not use mouth-to-mouth method if victim ingested or inhaled the substance; give artificial respiration with the aid of a pocket mask equipped with a one-way valve or other proper respiratory medical device. Immediate medical attention is required.
Ingestion	Do not induce vomiting. Call a physician or Poison Control Center immediately.
Most important symptoms/effects	Breathing difficulties. Symptoms of overexposure may be headache, dizziness, tiredness, nausea and vomiting.
Notes to Physician	Treat symptomatically

5. Fire-fighting measures

Suitable Extinguishing Media	Use water spray, alcohol-resistant foam, dry chemical or carbon dioxide. Cool closed containers exposed to fire with water spray.
Unsuitable Extinguishing Media	No information available
Flash Point	58 °C / 136.4 °F
Method -	No information available
Autoignition Temperature	No information available
Explosion Limits	
Upper	No data available
Lower	No data available
Sensitivity to Mechanical Impact	No information available
Sensitivity to Static Discharge	No information available

Specific Hazards Arising from the Chemical

Flammable. Risk of ignition. Vapors may form explosive mixtures with air. Vapors may travel to source of ignition and flash back. Containers may explode when heated. Thermal decomposition can lead to release of irritating gases and vapors. Keep product and empty container away from heat and sources of ignition. Vapors may form explosive mixtures with air.

Hazardous Combustion Products

Nitrogen oxides (NOx) Carbon monoxide (CO) Carbon dioxide (CO₂)

Protective Equipment and Precautions for Firefighters

As in any fire, wear self-contained breathing apparatus pressure-demand, MSHA/NIOSH (approved or equivalent) and full protective gear. Thermal decomposition can lead to release of irritating gases and vapors.

NFPA

Health	Flammability	Instability	Physical hazards
2	2	1	N/A

6. Accidental release measures

Personal Precautions	Use personal protective equipment. Ensure adequate ventilation. Keep people away from and upwind of spill/leak. Evacuate personnel to safe areas. Remove all sources of ignition. Take precautionary measures against static discharges.
Environmental Precautions	Should not be released into the environment.
Methods for Containment and Clean Up	Soak up with inert absorbent material. Keep in suitable, closed containers for disposal. Remove all sources of ignition. Use spark-proof tools and explosion-proof equipment.

7. Handling and storage

Handling	Wear personal protective equipment. Do not get in eyes, on skin, or on clothing. Use only under a chemical fume hood. Do not breathe vapors or spray mist. Do not ingest. Keep
-----------------	--

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

away from open flames, hot surfaces and sources of ignition. Use only non-sparking tools. Take precautionary measures against static discharges.

Storage

Keep containers tightly closed in a dry, cool and well-ventilated place. Keep away from heat and sources of ignition. Flammables area.

8. Exposure controls / personal protection

Exposure Guidelines

This product does not contain any hazardous materials with occupational exposure limits established by the region specific regulatory bodies.

Engineering Measures

Use only under a chemical fume hood. Use explosion-proof electrical/ventilating/lighting/equipment. Ensure that eyewash stations and safety showers are close to the workstation location. Ensure adequate ventilation, especially in confined areas.

Personal Protective Equipment

Eye/face Protection

Wear appropriate protective eyeglasses or chemical safety goggles as described by OSHA's eye and face protection regulations in 29 CFR 1910.133 or European Standard EN166.

Skin and body protection

Long sleeved clothing.

Respiratory Protection

Follow the OSHA respirator regulations found in 29 CFR 1910.134 or European Standard EN 149. Use a NIOSH/MSHA or European Standard EN 149 approved respirator if exposure limits are exceeded or if irritation or other symptoms are experienced.

Hygiene Measures

Handle in accordance with good industrial hygiene and safety practice.

9. Physical and chemical properties

Physical State	Liquid
Appearance	Colorless
Odor	No information available
Odor Threshold	No information available
pH	No information available
Melting Point/Range	No data available
Boiling Point/Range	No information available
Flash Point	58 °C / 136.4 °F
Evaporation Rate	No information available
Flammability (solid,gas)	Not applicable
Flammability or explosive limits	
Upper	No data available
Lower	No data available
Vapor Pressure	No information available
Vapor Density	No information available
Specific Gravity	1.030
Solubility	miscible
Partition coefficient; n-octanol/water	No data available
Autoignition Temperature	No information available
Decomposition Temperature	No information available
Viscosity	No information available
Molecular Formula	C3 D7 N O
Molecular Weight	80.15

10. Stability and reactivity

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

Reactive Hazard	None known, based on information available
Stability	Stable under normal conditions. Hygroscopic.
Conditions to Avoid	Keep away from open flames, hot surfaces and sources of ignition. Excess heat. Incompatible products.
Incompatible Materials	Halogens, Acid chlorides, Chloroformates, Reducing agents
Hazardous Decomposition Products	Nitrogen oxides (NOx), Carbon monoxide (CO), Carbon dioxide (CO ₂)
Hazardous Polymerization	Hazardous polymerization does not occur.
Hazardous Reactions	None under normal processing.

11. Toxicological information

Acute Toxicity

Product Information

Component Information

Toxicologically Synergistic Products No information available

Delayed and immediate effects as well as chronic effects from short and long-term exposure

Irritation	Irritating to eyes
Sensitization	No information available
Carcinogenicity	The table below indicates whether each agency has listed any ingredient as a carcinogen.

Component	CAS-No	IARC	NTP	ACGIH	OSHA	Mexico
N,N-D[(2H3)methyl(2H)]formamide	4472-41-7	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed	Not listed

Mutagenic Effects	No information available
Reproductive Effects	No information available.
Developmental Effects	May cause harm to the unborn child.
Teratogenicity	No information available.
STOT - single exposure	None known
STOT - repeated exposure	None known
Aspiration hazard	No information available
Symptoms / effects, both acute and delayed	Symptoms of overexposure may be headache, dizziness, tiredness, nausea and vomiting
Endocrine Disruptor Information	No information available
Other Adverse Effects	The toxicological properties have not been fully investigated.

12. Ecological information

Ecotoxicity

Do not empty into drains.

Persistence and Degradability	Miscible with water Persistence is unlikely based on information available.
Bioaccumulation/ Accumulation	No information available.

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

Mobility Will likely be mobile in the environment due to its water solubility.

13. Disposal considerations

Waste Disposal Methods Chemical waste generators must determine whether a discarded chemical is classified as a hazardous waste. Chemical waste generators must also consult local, regional, and national hazardous waste regulations to ensure complete and accurate classification.

14. Transport information

DOT

UN-No UN2265
 Proper Shipping Name N,N-DIMETHYLFORMAMIDE
 Hazard Class 3
 Packing Group III

TDG

UN-No UN2265
 Proper Shipping Name N,N-DIMETHYLFORMAMIDE
 Hazard Class 3
 Packing Group III

IATA

UN-No UN2265
 Proper Shipping Name N,N-DIMETHYLFORMAMIDE
 Hazard Class 3
 Packing Group III

IMDG/IMO

UN-No UN2265
 Proper Shipping Name N,N-DIMETHYLFORMAMIDE
 Hazard Class 3
 Packing Group III

15. Regulatory information

All of the components in the product are on the following inventory lists: X = listed

International inventories

Component	TSCA	DSL	NDSL	EINECS	ELINCS	NLP	PICCS	ENCS	AICS	IECSC	KECL
N,N-Di([2H3]methyl)[2H]formamide	-	-	-	224-745-8	-	-	-	-	-	X	-

Legend:

X - Listed

E - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(e) Consent order under TSCA.

F - Indicates a substance that is the subject of a Section 5(f) Rule under TSCA.

N - Indicates a polymeric substance containing no free-radical initiator in its inventory name but is considered to cover the designated polymer made with any free-radical initiator regardless of the amount used.

P - Indicates a commenced PMN substance

R - Indicates a substance that is the subject of a Section 6 risk management rule under TSCA.

S - Indicates a substance that is identified in a proposed or final Significant New Use Rule

T - Indicates a substance that is the subject of a Section 4 test rule under TSCA.

XU - Indicates a substance exempt from reporting under the Inventory Update Rule, i.e. Partial Updating of the TSCA Inventory Data Base Production and Site Reports (40 CFR 710(B)).

Y1 - Indicates an exempt polymer that has a number-average molecular weight of 1,000 or greater.

Y2 - Indicates an exempt polymer that is a polyester and is made only from reactants included in a specified list of low concern reactants that comprises one of the eligibility criteria for the exemption rule.

U.S. Federal Regulations

TSCA 12(b) Not applicable

SARA 313 Not applicable

N,N-Dimethylformamide-d7

Revision Date 24-May-2017

SARA 311/312 Hazard Categories

Acute Health Hazard	Yes
Chronic Health Hazard	Yes
Fire Hazard	Yes
Sudden Release of Pressure Hazard	No
Reactive Hazard	No

CWA (Clean Water Act) Not applicable

Clean Air Act Not applicable

OSHA Occupational Safety and Health Administration
Not applicable

CERCLA
Not applicable

California Proposition 65 This product does not contain any Proposition 65 chemicals

U.S. State Right-to-Know Regulations Not applicable

U.S. Department of Transportation

Reportable Quantity (RQ): N
DOT Marine Pollutant N
DOT Severe Marine Pollutant N

U.S. Department of Homeland Security
This product does not contain any DHS chemicals.

Other International Regulations

Mexico - Grade No information available

16. Other information

Prepared By Regulatory Affairs
Thermo Fisher Scientific
Email: EMSDS.RA@thermofisher.com

Creation Date 12-Jan-2015

Revision Date 24-May-2017

Print Date 24-May-2017

Revision Summary This document has been updated to comply with the US OSHA HazCom 2012 Standard replacing the current legislation under 29 CFR 1910.1200 to align with the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals (GHS).

Disclaimer

The information provided in this Safety Data Sheet is correct to the best of our knowledge, information and belief at the date of its publication. The information given is designed only as a guidance for safe handling, use, processing, storage, transportation, disposal and release and is not to be considered a warranty or quality specification. The information relates only to the specific material designated and may not be valid for such material used in combination with any other materials or in any process, unless specified in the text

End of SDS